

Untersuchungen zur semiklassischen Theorie
des optischen Potentials
(Korrekturen zur Lokalen Dichte Approximation
im Rahmen der Greenfunktionstheorie)

Roland Brugger

Untersuchungen zur semiklassischen Theorie
des optischen Potentials
(Korrekturen zur Lokalen Dichte Approximation
im Rahmen der Greenfunktionstheorie)

Dissertation der Fakultät für Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität
München

Vorgelegt von
Roland Brugger
aus
München

München, den 28. Mai 1986

1. Gutachter: Prof. Dr. M. Weigel
2. Gutachter: Prof. Dr. H. Bross

Tag der mündlichen Prüfung: 31.7.1986

Abstract

This work deals with a semiclassical expansion of the microscopic nucleon-nucleus optical potential. The investigation is based on the microscopic theory of the optical potential within the Green's function scheme in the ladder approximation. After transforming the general set of equations for the ladder approximation into phase-space representation, a semiclassical expansion of the equations is given. In zeroth order the expansion agrees with the nuclear matter approach and thus coincides with the usual starting point for a treatment of the optical potential, i.e. the "Local Density Approximation" (LDA).

Well-known techniques of semiclassical theories (Wigner representation, Wigner-Kirkwood expansion of an operator product, etc.) are utilized to derive this formalism.

It allows a systematic and, in principle, selfconsistent treatment of higher order terms, which goes beyond the LDA-approach. Furthermore, because of a reordering of the integral equation for the effective two-body force (K-matrix) it is possible to incorporate (semi-)phenomenologically determined nuclear matter interactions.

The semiclassical expansion is used for an investigation of the first corrections beyond the LDA-approach. These corrections depend on gradient- and curvature-terms of the nuclear effective single particle potential and of the nuclear density(matrix) as well as on energy- and momentum-derivatives of the nuclear matter K-matrix.

A numerical calculation, based on the "Brueckner-Hartree-Fock theory with 'continuous choice' of the single particle potential", shows that the first corrections to the optical potential are not negligible for low and medium energies (up to 100 MeV). They result in an improved description

of the real and imaginary parts of the optical potential in the region of the nuclear surface. Until now this improvement has been achieved only (partly) by a phenomenological correction or by use of the heuristic folding model.

Zusammenfassung

Diese Arbeit behandelt eine semiklassische Entwicklung des mikroskopischen optischen Potentials für die Nukleonenstreuung an Atomkernen. Grundlage der Untersuchung ist die mikroskopische Theorie des optischen Potentials im Rahmen der Theorie der Greenschen Funktionen in Leiternäherung. Es wird eine semiklassische Entwicklung der allgemeinen Gleichungen der Leiternäherung in der Phasenraumdarstellung angegeben, deren nullte Ordnung die Formulierung des Kernmaterieproblems liefert und damit den bisher in der Literatur üblichen Ausgangspunkt für die Behandlung des optischen Potentials, die "Lokale-Dichte-Approximation" (LDA).

Die dabei angewandten Techniken (Wigner-darstellung, Wigner-Kirkwood-Entwicklung eines Operatorprodukts, etc.) sind von semiklassischen Theorien her bekannt.

Das Entwicklungsschema ermöglicht eine systematische und im Prinzip selbstkonsistente Behandlung der höheren, über die Kernmaterie- (=LDA) Formulierung hinausgehenden Ordnungen. Des weiteren läßt eine Umordnung der Integralgleichung für die effektive Zweiteilchenwechselwirkung (K-Matrix) auch die Verwendung anderer, nicht-mikroskopisch bestimmter Kernmateriewechselwirkungen zu.

Das semiklassische Entwicklungsschema wird zur Untersuchung der ersten Korrekturen zur LDA-Näherung des optischen Potentials herangezogen. Es handelt sich dabei sowohl um Gradienten- und Krümmungsterme des effektiven Einteilchen-Kernpotentials und der Kerndichte(matrix) als auch um Energie- und Impulsableitungen der effektiven Kernmateriewechselwirkung.

Eine numerische Rechnung auf Basis der "Brueckner-Hartree-Fock-Theorie mit 'continuous choice' des Einteilchenpotentials" zeigt, daß die Korrekturen für kleine und mittlere Energien (bis etwa 100 MeV) einen nichtvernachlässigbaren Beitrag zum optischen Potential liefern. Sie bewirken eine

deutliche Verbesserung der bislang unbefriedigenden - nur phänomenologisch oder mit dem heuristischen Faltungsansatz korrigierten - Beschreibung des Potentialverlaufs von Real- und Imaginärteil im Oberflächenbereich des Kerns.

Inhalt

	Seite
1. Einleitung	1
2. Beschreibung eines Vielfermionensystems mit Hilfe von Greenfunktionen	9
2.1. Feldtheoretische Formulierung; Greenfunktionen	9
2.2. Approximationsschemata	14
3. Lösungsmethoden der Leiternäherung für Kernmaterie	20
3.1. Energie- und Impulsdarstellung	20
3.2. Analytische Eigenschaften	23
3.3. Näherungen	29
3.4. Übertragung auf endliche Kerne; Lokale-Dichte- Approximation (LDA)	34
4. Phasenraumdarstellung und semiklassische Entwicklung der Leiternäherung	37
4.1. Wignertransformation; Wigner-Kirkwood-Entwicklung	38
4.2. Phasenraumdarstellung der Gleichungen der Leiter- näherung	42
4.2.1. Die Gleichungen	42
4.2.2. Das Entwicklungsschema	45
4.2.3. Die semiklassische Entwicklung der Dysongleichung	48
4.2.4. Umordnung des Iterationsschemas für die Leiter- gleichung	51
4.3. Andere Entwicklungsschemata	53
4.3.1. Die Erweiterte-Thomas-Fermi (ETF) - Theorie	53
4.3.2. Die Methode der "lokalen effektiven Kräfte"	56
4.4. Die semiklassische Entwicklung bis zur 2. Ordnung	58
4.4.1. Die Gleichungen	58
4.4.2. Die Entkopplung der Gleichungen	62
4.4.3. Weitere Näherungen	66
5. Das mikroskopische optische Potential; LDA-Näherung und semiklassische Korrekturen	68
5.1. Die LDA-Näherung	70
5.2. Korrekturen durch den Einteilchenpropagator	76

	Seite
5.3. Korrekturen durch die effektive Zweiteilchen- wechselwirkung	81
5.4. Korrekturen durch die Faltungsgleichung	86
6. Die verwendete Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung	92
7. Numerische Auswertung und Parameterwahl	99
8. Numerische Ergebnisse und Diskussion	106
8.1. Numerische Ergebnisse für die einzelnen Korrek- turen	108
8.2. Numerische Ergebnisse für das optische Potential	115
8.3. Zusammenfassung und Schlußbemerkungen	125
A. Anhänge	129
Tabellen	162
Abbildungsunterschriften	168
Abbildungen	171
Literaturverzeichnis	189

1. Einleitung

Die elastische Streuung eines Nukleons durch einen Atomkern wird seit langem erfolgreich mit Hilfe des optischen Modells beschrieben [LS52, FWP54]. Der an sich sehr komplizierte Prozeß der Wechselwirkung des Projektilnukleons mit den Targetnukleonen wird pauschal durch ein Einteilchenpotential erfaßt, wobei das Herausprojizieren aller inelastischen Reaktionskanäle durch einen Imaginärteil erreicht wird [Ho63, Ho71]. Seinen Namen erhält das optische Modell durch den Vergleich mit der Optik. Die Beschreibung entspricht der Behandlung eines Kerns als ein Medium mit einem komplexen Brechungsindex, wobei eine einfallende (Teilchen-)Welle sowohl gebrochen als auch absorbiert wird [Ho71].

Beschreibt man die Bewegung des einlaufenden (oder sich in einem homogenen Medium befindlichen) Teilchens durch eine ebene Welle, so führt der Imaginärteil des optischen Modell-Potentials auf eine komplexe Wellenzahl und damit zu einer Dämpfung der Einteilchenbewegung des Projektils. Der Realteil des optischen Modell-Potentials läßt sich als Fortsetzung des Schalenmodellpotentials für positive Energien verstehen [MBB85].

Diese zunächst rein phänomenologische Behandlung der elastischen Nukleon-Kernstreuung (einen ausführlichen Überblick gibt Hodgson in [Ho63, Ho71, Ho84a, Ho84b]) läßt sich auf verschiedene Weisen theoretisch begründen. Dem Faltungsmodell [GPT68, GMP70, GHK70] liegt die Vorstellung zugrunde, daß sich das effektive Kernpotential, das ein Projektil verspürt, aus der Summe der Einzelwechselwirkungen mit den Targetnukleonen ergibt; dieser Sachverhalt läßt sich vereinfacht als Faltung einer - sich von der freien unterscheidenden und noch näher zu bestimmenden - effektiven Zweiteilchenwechselwirkung mit der Kerndichte(matrix) schreiben.

Im Rahmen der formalen Kernreaktionstheorie kann man das ("verallgemeinerte") optische Potential mittels des Projektionsformalismus' von Feshbach [Fe58, Fe62], der auf einer direkten Analyse der Vielteilchen-Schrödingergleichung beruht, ableiten. Er läßt sich zwar prinzipiell zur Behandlung des optischen Potentials heranziehen, ist jedoch zur Erzielung numerischer Ergebnisse wenig geeignet [Ho71].

Eine alternative, auf den Methoden der Vielteilchentheorie beruhende Definition des optischen Potentials gaben Bell und Squires [BS59], die zeigten, daß der sog. Massenoperator der Greenfunktionstheorie - ein effektives Einteilchenpotential - mit dem "verallgemeinerten" optischen Potential identifiziert werden kann. Das "verallgemeinerte" optische Potential besitzt eine komplizierte Energieabhängigkeit und ist vor einem Vergleich mit dem (phänomenologischen) optischen Modell-Potential einem Energiemittelungsprozeß zu unterziehen (s. z.B. [MBB85]).

Einen allgemeinen Überblick über die frühen theoretischen Arbeiten zum "verallgemeinerten" optischen Potential gibt der Artikel von Fetter und Watson [FW65].

Die feldtheoretische Beschreibung im Rahmen der Greenfunktionstheorie besitzt einige Vorteile [We79], von denen an erster Stelle die automatisch korrekte Behandlung des Pauliprinzips (Ununterscheidbarkeit von Target- und Projektilnukleonen) zu nennen ist. Weiter bietet die einheitliche Beschreibung verschiedener Gebiete der Kernphysik mittels der Greenfunktionstheorie die Möglichkeit einer direkten Verknüpfung der Theorie des optischen Potentials mit anderen Bereichen, z.B. Kernstrukturuntersuchungen (RPA). Auch lassen sich die analytischen Eigenschaften des optischen Potentials mittels der Spektraldarstellung der Greenfunktionen in eindeutiger Weise bestimmen; dies ist für Untersuchungen, die auf Dispersionsrelationen zwischen Real- und Imaginärteil aufbauen, von Bedeu-

tung.

Auf der Basis der Greenfunktionstheorie haben sich im wesentlichen zwei unterschiedliche Wege in der Behandlung des optischen Potentials herausgebildet, die als "(Kern-)Struktur"- und als "(Kern-)Materie"-Methode bezeichnet werden.

"Struktur"-Rechnungen [VB76, BG79, OWM81, BBB83] beruhen auf dem Teilchen-Vibrations-Kopplungs-Modell (particle-vibration coupling model) [BBB83]. Die Anregungsmoden des Targetkerns werden explizit in die Betrachtung einbezogen, die Struktur der angeregten Zustände wird z.B. RPA-Rechnungen entnommen. Aufgrund der umfangreichen Informationen über den Targetkern lassen sich so detaillierte Aussagen über das optische Potential dieses speziellen Kerns, insbesondere über den Einfluß tiefliegender kollektiver Zustände auf den Imaginärteil gewinnen.

Im Unterschied dazu betrachtet die "Kernmaterie"-Methode [Rei64, HK74, GW76, JLM76, JLM77a,b, BR77a,b, MH78] zunächst den idealisierten Fall des räumlich homogenen Systems der Kernmaterie. Man versteht darunter eine unendlich ausgedehnte, homogene Fermiflüssigkeit ladungsfreier Nukleonen. Die auf diese Weise erreichte Vereinfachung gestattet es, im Rahmen der sog. Leiternäherung - für Kernmaterie werden die Teilchen-Teilchen-Korrelationen als die bedeutsamsten angesehen [WW71] - die effektive Zweiteilchenwechselwirkung aus der freien Nukleon-Nukleon-Kraft zu gewinnen und daraus den Massenoperator zu berechnen. Die Coulomb- und Isospineffekte realer Kerne werden auf störungstheoretischem Wege hinzugefügt. Den letzten Schritt bei der Bestimmung des optischen Potentials bildet dann die Übertragung des Kernmaterieergebnisses auf den endlichen Kern.

Versuche, die Leiternäherung für räumlich nicht-homogene Systeme auch für positive Einteilchenenergien direkt zu lösen, sind über die Behandlung

des einfachsten Falls (semi-infinite Kernmaterie) [Rey63] hinaus aufgrund der komplizierten Struktur der Gleichungen nicht unternommen worden. Deshalb benützt man hier eine Methode, die als "Lokale-Dichte-Approximation" (LDA) bekannt ist [Sa76, JLM77b, BR77b, GBR79]. Die zentrale Näherung der LDA besteht in der Annahme, daß an jedem Ort des Kerns lokal Kernmaterieverhältnisse mit der entsprechenden Dichte herrschen. Dieses Vorgehen liefert zwar relativ schnell und einfach die Ergebnisse für das optische Potential, ist jedoch recht grob [Ma79], da die Vernachlässigungen nicht nur die effektive Zweiteilchenwechselwirkung betreffen, sondern ebenfalls den Einteilchenpropagator (und damit die Dichtematrix) und die Integralstruktur der Gleichung zur Bestimmung des Massenoperators. Diese Unzulänglichkeit wird in der Literatur durch eine phänomenologische Korrektur der "einfachen" LDA - man erhält dann die sog. "verbesserte" LDA [JLM77b] - oder durch Verwendung des heuristischen Faltungsmodells [GBR79] (z.T.) korrigiert.

Insgesamt erweist sich der "Kernmaterie"-Weg als "komplementär" zu den "Struktur"-Rechnungen; er ist schon vom Ansatz her nicht dazu angelegt, Eigenschaften eines speziellen Kerns zu beschreiben, sondern man wird erwarten, Informationen über die "mittleren" Eigenschaften wie Volumenintegrale und rms-Radien des optischen Potentials zu erhalten [Ma79]. Speziell der Bereich sehr kleiner Energien wird von der "Kernmaterie"-Methode schlecht erfaßt, da das niederenergetische Spektrum der verschiedenen Kerne stark differiert.

Neben den modernen, auf einer mikroskopischen Behandlung der effektiven Zweiteilchenwechselwirkung beruhenden "Materie"-Rechnungen wurden schon früher statistische Methoden entwickelt [Be68, BBJ68], die den endlichen Kern mit "Materie"-Größen beschreiben und dabei häufig auf die aus der

Atomphysik bekannte Thomas-Fermi-Theorie zurückgreifen (s. z.B. [Ir72, HS85b] und die dort jeweils zitierte Literatur). Die Thomas-Fermi-Theorie besitzt eine enge Beziehung zur LDA, da auch hier die zentrale Näherung in der Annahme lokal konstanter "Mediums"verhältnisse besteht [RS80, Kap.5].

Im Zuge der verstärkten Beachtung, die semiklassische Methoden in der Kernphysik in den letzten Jahren erfahren haben, wurde die Thomas-Fermi-Theorie wieder aufgegriffen und mit der sog. "Erweiterten Thomas-Fermi-Theorie" (ETF) [RS80] eine Methode entwickelt, die mittels einer Gradientenentwicklung eine differenziertere Behandlung der Ortsabhängigkeit des betrachteten Systems erlaubt. Eine Vielzahl von Untersuchungen, die sich mit statischen Kerneigenschaften wie Bindungsenergie, Dichte, effektives Einteilchenpotential (optisches Potential) etc. beschäftigen, sind auf der Basis der ETF-Theorie bzw. ihrer Verfeinerungen und Weiterentwicklungen durchgeführt worden [Ki67, JB75, BJC76, Bh77, DBS78, GV79, GV80, DSB80, BDB84, HS85a, HS85b]. Für einen Überblick über die Anwendung semiklassischer Methoden in der Kernphysik wird auf die Literatur verwiesen, z.B. [RS80, Kap.13].

Das Ziel der vorliegenden Arbeit besteht darin, mit Hilfe der in der ETF-Theorie entwickelten semiklassischen Techniken (Wignertransformation, Wigner-Kirkwood-Entwicklung eines Operatorprodukts, etc.) [Wi32, Ki33, GV79] die Übertragung der Ergebnisse mikroskopischer Kernmaterierechnungen auf endliche Kerne bei der Bestimmung des verallgemeinerten optischen Potentials zu untersuchen. Das Heranziehen der ETF-Techniken bietet sich an, da die hierfür üblicherweise verwendete LDA im wesentlichen der Thomas-Fermi-Näherung entspricht und damit der niedrigsten Ordnung der ETF-Entwicklung.

Grundlage der Untersuchung bildet die Greenfunktionstheorie in Leiternäherung, für die ein Formalismus entwickelt wird, der eine exakte Behandlung der - bislang nur phänomenologisch bzw. mit einem heuristischen Ansatz berechneten - Korrekturen zur "einfachen" LDA erlaubt. In der Phasenraumdarstellung, auch gemischte Orts-Impuls-Darstellung oder Wigner-darstellung genannt, bildet das allgemeine Gleichungssystem der Leiternäherung die Basis einer semiklassischen Entwicklung, deren nullte Ordnung die Formulierung des Kernmaterieproblems (= LDA-Näherung) liefert. Höhere Ordnungen (=Korrekturen zur LDA) lassen sich in systematischer Weise und selbstkonsistent aus den niedrigeren Ordnungen bestimmen. Das Entwicklungsschema ähnelt in gewisser Weise einer "M"-Entwicklung der Leiternäherung, die schon in der Atomphysik verwendet wurde, siehe z.B. [BB61, Ba61].

Im 2. Abschnitt wird zunächst eine kurze Darstellung der feldtheoretischen Formulierung des Vielteilchenproblems im Greenfunktionsformalismus gegeben. Es schließt sich eine Beschreibung der in der Kernphysik üblichen Approximationsschemata im Rahmen dieser Theorie an (Hartree-Fock-, RPA-, Leiternäherung).

Der 3. Abschnitt behandelt die Grundlage der semiklassischen Entwicklung des optischen Potentials, die Leiternäherung für das Kernmaterieproblem. Für deren Lösung erweist sich die Kenntnis der analytischen Eigenschaften der beteiligten Funktionen - Ein- und Zweiteilchenpropagatoren, Massenoperator und effektive Kernmateriewechselwirkung - in der Energiedarstellung als nützlich. Der Diskussion dieser allgemeinen Eigenschaften folgt die Beschreibung der üblichen Approximationen, die für eine praktische (= numerische) Behandlung des Problems notwendig sind. Es haben sich hier im wesentlichen zwei Methoden herausgebildet, die unter den Be-

griffen "A-Theorien" [WW71] und "Brueckner-Theorien" [JLM76] bekannt sind. Die wichtigsten Versionen dieser beiden Methoden werden kurz dargestellt, insbesondere die sog. "Brueckner-Hartree-Fock-Theorie mit 'continuous choice' des Einteilchenpotentials", auf die später für die Berechnung numerischer Ergebnisse zurückgegriffen wird. Den Abschluß bildet die Beschreibung der Standardmethode zur Übertragung der Kernmaterieergebnisse auf endliche Kerne, die LDA.

Der 4. Abschnitt behandelt die Transformation des allgemeinen, nicht die Translationsinvarianz des Kernmaterieproblems ausnützenden Gleichungssystems der Leiternäherung in die Phasenraumdarstellung. Es schließt sich die Beschreibung des semiklassischen Entwicklungsschemas an, wobei mittels einer Umordnung der Iteration in der Integralgleichung für die effektive Zweiteilchenwechselwirkung eine Formulierung gefunden wird, welche die an sich notwendige Lösung immer komplizierterer Integralgleichungen für die höheren Ordnungen vermeidet. Darüberhinaus ergibt sich so die Möglichkeit, auch andere, (semi-)phänomenologisch bestimmte Kernmateriewechselwirkungen in den Formalismus einzubauen. Im Anschluß werden die Entwicklung des Gleichungssystems bis zur zweiten Ordnung (= erste nicht-verschwindende Korrektur) und einige weitere Näherungen diskutiert.

Der 5. Abschnitt beinhaltet eine detaillierte Darstellung der LDA-Version des verallgemeinerten optischen Potentials und der einzelnen Korrekturterme der zweiten Ordnung, deren physikalische Bedeutung diskutiert wird.

Im 6. und 7. Abschnitt werden die benutzte Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung und einige rechentechnische Aspekte der numerischen Auswertung behandelt. Um die Untersuchung der Korrekturen nicht zu kompliziert und unübersichtlich zu gestalten, wurde für die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung eine relativ einfache Wahl getroffen. Es handelt sich um ein separables S-Wellen-Potential, das schon früher für schematische Kernmaterierechnun-

gen [WW68, MH78] benutzt wurde.

Aus demselben Grund wird auch auf die Behandlung der Coulomb- und Isovektorbeiträge verzichtet, welche bei der Übertragung von Kernmaterieergebnissen auf "reale" Kerne noch hinzugefügt werden müssen. Diese Vorgehensweise erscheint bei dem in dieser Arbeit verfolgten Hauptziel - neben der Darstellung der allgemeinen semiklassischen Theorie des optischen Potentials die Bestimmung der ersten Korrekturen (Ermittlung der Größenordnung, Orts- und Energieabhängigkeit, etc.) zur Standard-LDA - legitim (und ist üblich, vgl. z.B. [Be68, HS85a, HS85b]), da die genannten Beiträge weder einen direkten Einfluß auf die LDA-Näherung noch auf die Korrekturen hierzu besitzen. Wie auf störungstheoretische Weise Coulomb- und Isovektoreffekte bei den Kernmaterieresultaten berücksichtigt werden können, wird ausführlich von Mahaux und Mitarbeitern [JLM77a] behandelt.

Auf die sich aus diesen Vernachlässigungen ergebenden Unzulänglichkeiten der Rechnung wird bei der Diskussion der numerischen Ergebnisse eingegangen, die sich im 8. Abschnitt anschließt. Zunächst werden die Einzelkorrekturen behandelt, dann die Änderungen, die das (LDA-)optische Potential durch die Korrekturen erfährt. Da ein direkter Vergleich des Potentialverlaufs mit den experimentellen Werten oder theoretischen Ergebnissen anderer Autoren nur von begrenzter Aussagekraft ist [Ho84a], werden zusätzlich die Volumenintegrale und rms-Radien des optischen Potentials berechnet und verglichen.

Um den Fluß der Darstellung nicht zu unterbrechen, sind eine Reihe von Ausführungen und Ableitungen in den Anhang verlegt worden. Eine Inhaltsübersicht ist zu Beginn des Anhangteils zu finden.

2. Beschreibung eines Vielfermionensystems mit Hilfe von Greenfunktionen

Atomkerne und das Modell der Kernmaterie sind typische Beispiele für Vielteilchensysteme. Es liegt daher nahe, zur Behandlung kernphysikalischer Probleme die Techniken und Konzepte der Vielteilchentheorie [Th61, No64, AGD63, Ki67, FW71, WW71, Br72, JLM76, Ma76, LL80] heranzuziehen.

Eine zentrale Rolle spielt hierbei der Begriff der Greenfunktion, der auf dem Formalismus der Quantenfeldtheorie beruht.

Im 2. Abschnitt wird daher einleitend die feldtheoretische Formulierung des Vielfermionenproblems skizziert und die Definition der Greenfunktion gegeben. Es schließt sich ein kurzer Überblick über die in der Kernphysik üblichen Approximationstechniken der Greenfunktionstheorie an.

2.1. Feldtheoretische Formulierung; Greenfunktionen

Die feldtheoretische Beschreibung [FW71, Sch61] eines Systems wechselwirkender Fermionen geschieht mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a_1^\dagger$ bzw. a_1 . Im Schrödingerbild steht der Index "1" für einen vollständigen Satz von Einteilchenquantenzahlen. Bezeichnet man mit $|>$ den Vakuumzustandsvektor, so ergibt die Wirkung des Operators $a_1^\dagger$ auf $|>$ den Zustand, der ein Teilchen mit den Quantenzahlen "1" beschreibt:

$$a_1^\dagger |> = |1> . \quad (2.1)$$

Für den Vernichtungsoperator a_1 gilt:

$$a_1 |> = 0 . \quad (2.2)$$

Das Pauliprinzip kommt durch die Antikommutatorbeziehungen

$$\{a_1^\dagger, a_2\} := a_1^\dagger a_2 + a_2 a_1^\dagger = \delta_{12} \quad , \quad (2.3)$$

$$\{a_1^\dagger, a_2^\dagger\} = \{a_1, a_2\} = 0 \quad (2.4)$$

zum Ausdruck.

Ein- und Zweiteilchenoperatoren lassen sich mittels der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in der folgenden Form schreiben:

$$F^{(1)} = f_{11}^{(1)} a_1^\dagger a_1 \quad , \quad (2.5)$$

mit

$$f_{11}^{(1)} = \langle 1 | F^{(1)} | 1 \rangle \quad (2.6)$$

und

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} f_{12,1'2'}^{(2)} a_1^\dagger a_2^\dagger a_{2'} a_{1'} \quad , \quad (2.7)$$

mit

$$f_{12,1'2'}^{(2)} = \frac{1}{2} (\langle 12 | F^{(2)} | 1'2' \rangle - \langle 12 | F^{(2)} | 2'1' \rangle) \quad , \quad (2.8)$$

wobei über doppelt vorkommende Indices summiert bzw. integriert wird.

Beschränkt man sich auf Zweiteilchenkräfte, so hat der Hamiltonoperator H die Gestalt:

$$H = t_{11} a_1^\dagger a_1 + \frac{1}{2} \bar{v}_{12,1'2'} a_1^\dagger a_2^\dagger a_{2'} a_{1'} \quad ; \quad (2.9)$$

t steht für die kinetische Energie, $\bar{v}$ bezeichnet die antisymmetrisierte Zweiteilchenwechselwirkung.

Für die Definition der Greenfunktionen werden die Feldoperatoren im Heisenbergbild benötigt, zu dem man mittels des Zeitentwicklungsoperators

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \quad (2.10)$$

übergeht:

$$\begin{aligned} a^\dagger(1) &:= a_1^\dagger(t_1) = U^\dagger(t_1) a_1^\dagger U(t_1) , \\ a(1) &:= a_1(t_1) = U^\dagger(t_1) a_1 U(t_1) . \end{aligned} \quad (2.11)$$

Der Index "1" und das Zeitargument t_1 sind zum Argument "1" zusammengefaßt.

Die n-Teilchen-Greenfunktion oder (2n)-Punkt-Funktion ist als Grundzustandserwartungswert eines zeitgeordneten Produkts von Feldoperatoren definiert [Mi67, FW71]:

$$g(1 \dots n, 1' \dots n') := (-i)^n \langle 0 | T [a(1) \dots a(n) a^\dagger(n') \dots a^\dagger(1')] | 0 \rangle . \quad (2.12)$$

Mit $|0\rangle$ ist der Grundzustand des A-Teilchensystems bezeichnet. Der Zeitordnungsoperator T ordnet die Feldoperatoren nach wachsendem Zeitargument von rechts nach links und multipliziert das Produkt mit dem Vorzeichen der Permutation.

Mit dem Schrödingeroperator

$$s(1, 1') := \delta(t_1 - t_1') (-i\hbar \delta_{11'} \frac{\partial}{\partial t_1} + t_{11'}) , \quad (2.13)$$

der verallgemeinerten Zweiteilchenwechselwirkung

$$\bar{v}(12, 1'2') := \delta(t_1 - t_2) \delta(t_1' - t_2') \delta(t_2 - t_1') \bar{v}_{12, 1'2'} \quad (2.14)$$

und den Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für die Feldoperatoren läßt sich eine Bewegungsgleichung für die Greenfunktionen herleiten [MS59, We66], die in komplizierter Weise die 2n-Punkt-Funktion mit der 2(n-1)- und der 2(n+1)-Punkt-Funktion verknüpft:

$$-s(1,1'') g(1''2 \dots n, 1' \dots n') + i \bar{v}(1(n+1)', 1''(n+1)) \times$$

$$g(1''2 \dots n (n+1)'^+, 1' \dots n'(n+1)'^{++}) =$$

$$\sum_{m=1}^n (-1)^{m+1} \delta(1, m') g(2 \dots n, 1' \dots (m-1)' (m+1)' \dots n') . \quad (2.15)$$

Für $n=0$ ist $g_{n=0} = \mathbb{N}$ gesetzt. Die "+"-Zeichen in den Argumenten bedeuten, daß das zugehörige Zeitargument um einen infinitesimalen positiven Betrag zu verschieben ist; dies gewährleistet die korrekte Folge derjenigen Feldoperatoren, deren Zeitargumente durch die verallgemeinerte Wechselwirkung gleichgesetzt wurden.

Kennt man die entsprechenden Greenfunktionen, so ergeben sich die Erwartungswerte für die gesuchten physikalischen Observablen durch (mehr oder weniger) einfache mathematische Operationen wie Limesbildung, Differentiation oder Integration. Das soll an zwei für diese Arbeit wichtigen Beispielen demonstriert werden: der Einteilchendichtematrix $\rho(r, r')$ und der optischen Modellwellenfunktion $\phi_{k(+)}(r)$.

Die Dichtematrix $\rho(r, r')$ ist durch

$$\rho(r, r') = \langle 0 | a^\dagger(r') a(r) | 0 \rangle \quad (2.16)$$

definiert [RS80]. r steht hier für die Variablen $\vec{r}, \sigma, \tau$ (Ort, Spin, Iso-spin). Betrachtet man die Einteilchengreenfunktion

$$g(r, t, r', t') = -i \langle 0 | T [a(r, t) a^\dagger(r', t')] | 0 \rangle \quad (2.17)$$

für den Grenzwert $t \rightarrow t' + \eta$ ($\eta > 0$, infinitesimal):

$$\lim_{t \rightarrow t' + \eta} g(r, t, r', t') = i \langle 0 | a^\dagger(r') a(r) | 0 \rangle \quad (2.18)$$

und beachtet, daß g nur von der Zeitdifferenz $t-t'$ abhängt, so ergibt sich die Dichtematrix aus dem folgenden Limes:

$$\rho(r, r') = -i \lim_{t \rightarrow t' + \eta} g(r, t, r', t') . \quad (2.19)$$

Das zweite Beispiel, die optische Modellwellenfunktion $\phi_{k(+)}(r)$, erfüllt die Schrödingergleichung [We79]:

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi_{k(+)}(r) + \int d^3 r' U_{\text{opt}}(r, r'; E_k) \phi_{k(+)}(r') = E_k \phi_{k(+)}(r). \quad (2.20)$$

E_k bezeichnet die Einschußenergie des Projektils. Identifiziert man das optische Modell-Potential U_{opt} mit dem Massenoperator M der Greenfunktionstheorie, so läßt sich zeigen [BS59], daß $\phi_{k(+)}(r)$ durch folgenden Grenzwert aus der Zweipunktfunktion zu gewinnen ist (der Beweis ist in Anhang A.1. zu finden):

$$\phi_{k(+)}(r) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{ing}(r, k; \omega = E_k) . \quad (2.21)$$

Die Einteilchengreenfunktion ist hier in einer gemischten Orts-Impuls- und der Energiedarstellung angegeben, s. dazu Kapitel 3.1..

2.2. Approximationsschemata

Bei (2.15) handelt es sich um ein gekoppeltes Gleichungssystem n-ter Ordnung, dessen Lösung der Lösung der Schrödingergleichung des n-Teilchenproblems äquivalent und somit in der Regel unmöglich ist. Mit Hilfe verschiedener Techniken wie der Funktionalableitungsmethode von Baym und Kadanoff [BK62] bzw. Brenig und Wagner [BW63], des Puff-Martin-Schwinger-formalismus' [MS59, Pu61] oder störungstheoretischer Überlegungen [No64] lassen sich Integralgleichungen finden, welche die n-Punkt-Funktion mit den Funktionen gleichen und niedrigeren Grades verknüpfen und damit (2.15) im Prinzip entkoppeln. In den Gleichungen treten dann sog. "Vertices" auf, die die Rolle von effektiven Wechselwirkungen einnehmen und in praktischen Anwendungen durch (weitere) Approximationen oder phänomenologische Parametrisierungen genähert werden. Einige der in der Kernphysik üblichen Verfahren werden im weiteren Verlauf dieses Kapitels angesprochen.

Da die meisten interessanten Observablen Ein- und Zweiteilchenoperatoren sind, werden vorwiegend die Zweipunkt- und die Vierpunktfunktion untersucht.

Die Zweipunktfunktion $g(1,2)$ gehorcht der Dysongleichung:

$$-(s(1,1') + M(1,1')) g(1',2) = \delta(1,2) ; \quad (2.22)$$

in integraler Form lautet sie:

$$g(1,2) = g_0(1,2) + g_0(1,1')M(1',1'')g(1'',2) . \quad (2.23)$$

Hierin ist g_0 die freie Zweipunktfunktion, d.h. diejenige Funktion, die der Gleichung (2.22) für $M = 0$ genügt. Da g die Propagation eines Teil-

chens auf dem Hintergrund des Vielteilchensystems beschreibt, heißt die Zweipunktfunktion auch Einteilchenpropagator. Die Größe M wird als Massenoperator bezeichnet; sie stellt eine Art effektives Einteilchenpotential dar und entspricht in der Quantenfeldtheorie der Selbstenergie. Ein Vergleich mit der Bewegungsgleichung (2.15) für $n = 1$ zeigt, daß

$$M(1,1')g(1',2) = -i \bar{v}(12',1'2'')g(1'2''^+,22'^{++}) \quad (2.24)$$

gilt.

Für die Behandlung der Vierpunktfunktion führt man die verallgemeinerte Streuamplitude ("reduzierbarer Vertex") Γ ein [WW71]:

$$g(12,1'2') = g(1,1')g(2,2') - g(1,2')g(2,1') + \frac{i}{\hbar}g(1,3)g(2,4)\Gamma(34,3'4')g(3',1')g(4',2') \quad (2.25)$$

welche die dynamischen Zweierkorrelationen beschreibt.

Unter Ausnutzung der bereits erwähnten Techniken lassen sich störungstheoretische Entwicklungen bzw. Bestimmungsgleichungen für Γ und M herleiten. Je nach Art der Problemstellung findet man mit Hilfe der "irreduziblen" Vertices K^{ph} ("irreduzible Teilchen-Loch-Wechselwirkung") und K^{pp} ("irreduzible Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung") verschiedene sog. Bethe-Salpeter-Gleichungen für Γ [No64, Mi67]:

$$\Gamma(12,1'2') = 2K^{pp}(12,1'2') + \frac{i}{\hbar}K^{pp}(12,34)g(3,3')g(4,4') \times \Gamma(3'4',1'2') \quad (2.26)$$

$$\Gamma(12,1'2') = K^{ph}(12,1'2') - \frac{i}{\hbar}K^{ph}(13,1'4)g(4,4')g(3',3) \times \Gamma(4'2,3'2') \quad (2.27)$$

Die zu K^{ph} korrespondierende Vierpunktfunktion L :

$$L(12,1'2') = g(12,1'2') - g(1,1')g(2,2') \quad (2.28)$$

heißt (verallgemeinerte) lineare Antwortfunktion und beschreibt die korrelierte Propagation eines Teilchen-Loch-Paares [FW71]. Die entsprechenden Bethe-Salpeter-Gleichungen für die Zweiteilchengreenfunktion und die lineare Antwortfunktion lauten:

$$g(12,1'2') = g(1,1')g(2,2') - g(1,2')g(2,1') - \frac{i}{\hbar}g(1,3)g(2,4) \times \\ K^{pp}(34,3'4')g(3'4',1'2') , \quad (2.29)$$

$$L(12,1'2') = -g(1,2')g(2,1') - \frac{i}{\hbar}g(1,3)g(3',1')K^{ph}(34,3'4') \times \\ L(4'2,42') . \quad (2.30)$$

Irreduzibel werden die Vertices K^{ph} und K^{pp} deshalb genannt, weil sie alle diejenigen Anteile von Γ enthalten, die (in der Terminologie der Graphen) nicht durch Zerschneiden einer einfachen Teilchen-Loch- bzw. Teilchen-Teilchen-Propagation in zwei Teile zerlegt werden können.

Für den reduzierten Vertex Γ gilt mit (2.25,29,30):

$$\Gamma(12,1''2'')g(1'',1')g(2'',2') = K^{pp}(12,1'',2'')g(1''2'',1'2') , \quad (2.31)$$

$$\Gamma(12'',21'')g(1'',1')g(2',2'') = -K^{ph}(12'',21'')L(1''2',2''1') . \quad (2.32)$$

Geeignete, dem jeweiligen Problem adäquate Näherungen für K^{pp} und K^{ph} bzw. Γ führen dann auf die in praktischen Rechnungen benutzten Approximationen.

Die erste und einfachste Näherung besteht darin, den reduzierten Vertex Γ durch die freie Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung $\bar{v}$ zu ersetzen:

$$\Gamma \longrightarrow \Gamma^{HF} := 2\bar{v} . \quad (2.33)$$

Man erhält auf diese Weise die Hartree-Fock (HF)-Approximation [WW71]. Physikalisch gesehen entspricht sie der Vernachlässigung aller dynamischer Zweiteilchenkorrelationen. Die Vierpunktfunktion lautet dementsprechend:

$$g(12,1'2') = g(1,1')g(2,2') - g(1,2')g(2,1') , \quad (2.34)$$

und das effektive Einteilchenpotential (2.24) nimmt die Gestalt

$$M^{\text{HF}}(1,1') = -2i\bar{v}(12,1'2')g(2',2^+) \quad (2.35)$$

an. Wegen des instantanen Charakters der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung ist M hier zeitunabhängig und daher auch (nach einer Fouriertransformation, s. Kapitel 3.1.) energieunabhängig.

Die aus der Landau-Theorie der Fermiflüssigkeiten [LL80] hervorgegangene Theorie der endlichen Fermisysteme (Theory of Finite Fermi Systems: FFS) [Mi67] beschäftigt sich mit den Anregungsspektren von Atomkernen. Da hierfür die Zustände aus der näheren Umgebung der Fermikante wichtig sind und diese durch Teilchen-Loch-Anregungen beschrieben werden, untersucht die FFS die Bethe-Salpeter-Gleichung für den Teilchen-Loch-Propagator L . Mit Hilfe mikroskopischer [WGH71, EW72] oder (semi-)phänomenologischer [SWW77] Verfahren zur Bestimmung von K^{ph} gelangt man schließlich zur "renormierten" RPA-Theorie, mit der sich Anregungsenergien, Übergangsdichten u.ä. berechnen lassen.

Die eingangs schon erwähnte Leiternäherung ergibt sich bei der Ersetzung des irreduziblen Vertex K^{pp} durch die freie Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung $\bar{v}$. Ihr Name rührt daher, daß man auf diese Weise zu einer Gleichung für die Streuamplitude Γ gelangt, mit der gerade alle Leitergraphen auf-

summiert werden (vgl. (2.26)):

$$K(12,1'2') = 2 \bar{v}(12,1'2') + \frac{i}{\hbar} \bar{v}(12,34)g(3,3')g(4,4') \times \\ K(3'4',1'2') , \quad (2.36)$$

wobei Γ in Leiternäherung hier als K-Matrix bezeichnet wird: $\Gamma^L \equiv K$.

In der Literatur finden sich für die K-Matrix auch andere Bezeichnungen, z.B. G [Be56, Da67, Be71], T [Pu61, BK62, FW65] oder t [MS59].

(2.36) wird im weiteren Verlauf häufig auch als "Leitergleichung" bezeichnet. Der Begriff "Leiternäherung" ist in der Literatur (leider) nicht einheitlich, da der intermediäre Teilchen-Teilchen-Propagator oft zusätzlich vereinfacht wird, s. Kapitel 3.3..

Es läßt sich zeigen [We66], daß die Beschränkung auf die Summation der Leitergraphen der Vernachlässigung aller Zweiteilchenkorrelationen entspricht, die nicht direkt durch die Wechselwirkung $\bar{v}$ miteinander verbunden sind. Diese Näherung ist dadurch gerechtfertigt, daß die Reichweite der Kernkräfte und der mittlere Abstand der Nukleonen in Kernmaterie in etwa die gleiche Größe haben und die Wellenfunktion zweier Nukleonen nur für kleine Abstände gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall verändert ist.

Die Leiternäherung besitzt die Eigenschaft, daß sich der Massenoperator in einer Art Faltungsprozedur aus K und g ergibt; kombiniert man (2.24) und (2.31), so gilt:

$$M(1,1') = -iK(12,1'2')g(2',2^+) . \quad (2.37)$$

Für (2.37) wird daher in dieser Arbeit auch der Begriff "Faltungsgleichung" verwendet.

Die Leiternäherung bildet seit den grundlegenden Arbeiten von Brueckner

und Mitarbeitern [BL55, Br55, BG58] bzw. von Martin und Schwinger [MS59] und Puff [Pu61] die Basis einer Vielzahl von Rechnungen, in denen Grundzustandseigenschaften von Kernen bzw. Kernmaterie wie Bindungsenergie pro Nukleon, Dichte, Kompressibilität oder das effektive Einteilchenpotential bzw. das optische Modell-Potential untersucht werden. Einen Überblick geben die zusammenfassenden Artikel [Da67, Be71, WW71, JLM76].

Da die Leiternäherung für das Kernmaterieproblem die Grundlage für die semiklassische Entwicklung des mikroskopischen optischen Potentials ist, wird die Theorie dieser Näherung im nächsten Abschnitt detaillierter dargestellt.

Wenn im weiteren kurz von "effektiven (Zweiteilchen-) Wechselwirkungen" gesprochen wird, so sind damit immer mikroskopische (effektive) Wechselwirkungen gemeint, die in der einen oder anderen Art als Näherungen zu Γ aus einer mikroskopischen Theorie gewonnen werden, z.B. die Puffsche T-Matrix oder die Bruecknersche G-Matrix (s. nächster Abschnitt). Soll eine (semi-) phänomenologisch bestimmte effektive Zweiteilchenwechselwirkung bezeichnet werden - in der Literatur wird häufig der Begriff "effektiv" pauschal in diesem Sinn verwendet -, so wird dies stets gesondert erwähnt.

3. Lösungsmethoden der Leiternäherung für Kernmaterie

3.1. Energie- und Impulsdarstellung

Gemäß den Ausführungen des zweiten Abschnitts betrachtet man in der Leiternäherung das folgende Gleichungssystem:

$$K(12,1'2') = 2 \bar{v}(12,1'2') + \bar{v}(12,34) \Lambda(34,3'4') K(3'4',1'2') , \quad (3.1)$$

$$- (s(1,1') + M(1,1')) g(1',2) = \hbar \delta(1,2) , \quad (3.2)$$

$$M(1,1') = -i K(12,1'2') g(2',2^+) , \quad (3.3)$$

$$\Lambda(12,1'2') = \frac{1}{\hbar} g(1,1') g(2,2') . \quad (3.4)$$

Die Diagonalbasis, die diese Gleichungen deutlich vereinfacht, ist aufgrund der Translationsinvarianz des Kernmaterieproblems die Impulsdarstellung:

$$(1,2) \longrightarrow (\vec{p}_1 \sigma_1 \tau_1, \vec{p}_2 \sigma_2 \tau_2) \longrightarrow (\vec{P}, \vec{p}, \sigma_1 \tau_1, \sigma_2 \tau_2) , \quad (3.5)$$

$$\vec{P} := \vec{p}_1 + \vec{p}_2 ; \quad \vec{p} := \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{2} .$$

$\vec{P}$ bzw. $\vec{p}$ bezeichnet den Schwerpunkts- bzw. Relativimpuls, σ_i bzw. τ_i jeweils die dritte Komponente von Spin bzw. Isospin der Teilchen.

Da wegen der Kernmaterieannahme die beteiligten Größen diagonal in den Spin-Isospin-Quantenzahlen sind, werden diese Indices ab jetzt unterdrückt und nur ein entsprechender Entartungsfaktor berücksichtigt bzw. sie werden erst wieder aufgenommen, wenn sie explizit benötigt werden (z.B. bei der Partialwellenentwicklung der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung).

Des weiteren stellt es sich als vorteilhaft heraus, die Theorie in der Energiedarstellung zu formulieren. Zu diesem Zweck werden die Gleichungen der folgenden Fouriertransformation unterzogen:

$$\begin{aligned}
 f(1 \dots n, 1' \dots n') &\equiv f_1 \dots n, 1' \dots n', (t_1 \dots t_n, t'_1 \dots t'_n) = \\
 &= (2\pi\hbar)^{-n} \int d\epsilon_1 \dots d\epsilon_n d\epsilon'_1 \dots d\epsilon'_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \left(\sum_{j=1}^n \epsilon_j t_j - \sum_{j=1}^n \epsilon'_j t'_j \right)\right) \times \\
 &\quad f_1 \dots n, 1' \dots n', (\epsilon_1 \dots \epsilon_n, \epsilon'_1 \dots \epsilon'_n) . \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

Durch die Homogenität der Zeit bedingt spalten alle Größen eine δ -Funktion in der Energie ab (Energieerhaltung).

Das Gleichungssystem (3.1-4) nimmt unter Ausnutzung aller Symmetrien die folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned}
 K(\vec{p}; \vec{p}', \epsilon) &= 2 \bar{v}(\vec{p}, \vec{p}') + \iint d^3q d^3q' \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \Lambda(\vec{p}; \vec{q}, \vec{q}', \epsilon) \times \\
 &\quad K(\vec{p}; \vec{q}', \vec{p}', \epsilon) , \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

$$\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m} - M(\vec{p}; \epsilon) \right) g(\vec{p}; \epsilon) = \hbar , \quad (3.8)$$

$$M(\vec{p}; \epsilon) = -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\eta\epsilon'} \int d^3q K(\vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+\epsilon') g(\vec{q}; \epsilon') , \quad (3.9)$$

$$\Lambda(\vec{p}; \vec{p}', \epsilon) = \frac{i}{\hbar} \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} \delta(\vec{p}-\vec{p}') g(\frac{\vec{p}+\vec{p}'}{2}; \frac{\epsilon}{2}+\epsilon') g(\frac{\vec{p}-\vec{p}'}{2}; \frac{\epsilon}{2}-\epsilon') . \quad (3.10)$$

Der Faktor "exp(i $\eta\epsilon'$)" in (3.9) entsteht durch die festgelegte Zeitordnung für die Argumente der Einteilchengreenfunktion in (3.3) und ist für die Eindeutigkeit der Behandlung der Pole von g bei der Energieintegration

nötig. (Bei komplexer Integration in (3.9) ist der Integrationsweg in der oberen Halbebene zu schließen.)

In den weiteren Kapiteln dieses Abschnitts werden die zur Lösung von (3.7-10) benötigten analytischen Eigenschaften der beteiligten Funktionen sowie die in der Literatur üblichen Näherungsverfahren skizziert; den Abschluß bildet die Darstellung der "Lokalen-Dichte-Approximation" (LDA), d.h. der Übertragung der Kernmaterieresultate auf endliche Kerne.

3.2. Analytische Eigenschaften

Die analytischen Eigenschaften der Zweipunktfunktion, des Massenoperators und der K-Matrix werden hier nur kurz und insoweit ausgeführt, wie sie für die direkte Argumentation in dieser Arbeit - insbesondere bei der Behandlung der Korrekturterme im fünften Abschnitt - benötigt werden. Eine ausführliche Darstellung der Theorie findet man bei [Lu61, BK62, WW71].

Die explizite Form der Einteilchengreenfunktion in der Energiedarstellung lautet:

$$\begin{aligned} \delta(\vec{p}-\vec{p}') \, g(\vec{p}; \epsilon) &= \mathbb{N} \langle 0 | a(\vec{p}) \frac{1}{\epsilon - H + E_0 + i\eta} a^\dagger(\vec{p}') | 0 \rangle + \\ &\quad \mathbb{N} \langle 0 | a^\dagger(\vec{p}') \frac{1}{\epsilon + H - E_0 - i\eta} a(\vec{p}) | 0 \rangle \quad . \end{aligned} \quad (3.11)$$

E_0 ist die Energie des Grundzustands.

Mit der positiv definiten Spektralfunktion

$$A(\vec{p}; \epsilon) = \frac{1}{\pi \mathbb{N}} \begin{cases} + \operatorname{Im} g(\vec{p}; \epsilon) & \text{für } \epsilon < \epsilon_F \\ - \operatorname{Im} g(\vec{p}; \epsilon) & \text{für } \epsilon > \epsilon_F \end{cases} \quad (\epsilon_F: \text{Fermienergie}), \quad (3.12)$$

wobei der Imaginärteil des Einteilchenpropagators durch

$$\begin{aligned} \delta(\vec{p}-\vec{p}') \operatorname{Im} g(\vec{p}; \epsilon) &= -\pi \mathbb{N} \langle 0 | a(\vec{p}) \delta(\epsilon - H + E_0) a^\dagger(\vec{p}') | 0 \rangle + \\ &\quad \pi \mathbb{N} \langle 0 | a^\dagger(\vec{p}') \delta(\epsilon + H - E_0) a(\vec{p}) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (3.13)$$

gegeben ist, gelangt man zu folgender wichtigen Spektraldarstellung:

$$g(\vec{p}; \epsilon) = \mathbb{N} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon' \frac{A(\vec{p}; \epsilon')}{\epsilon - \epsilon' - i\eta} + \mathbb{N} \int_{\epsilon_F}^{+\infty} d\epsilon' \frac{A(\vec{p}; \epsilon')}{\epsilon - \epsilon' + i\eta} \quad . \quad (3.14)$$

Die hier gewählte Energieskalierung unterscheidet sich von der für Kernmaterierechnungen üblichen Fixierung der Fermienergie bei $\epsilon_F = 0$, da das System in Hinblick auf die Übertragung auf endliche Kerne untersucht wird, wo eine feste Teilchenzahl vorgegeben ist, im Unterschied zu Kernmaterie, bei der die Fermienergie - dann identisch mit dem chemischen Potential - fixiert wird [AGD63].

Mit Hilfe der analytischen Fortsetzungen des Einteilchenpropagators und der anderen Funktionen in die komplexe Energieebene lassen sich die weiteren Untersuchungen in kompakter Weise formulieren. Diese Funktionen sollen mit Tilde "~" gekennzeichnet werden.

Die Gleichung

$$\tilde{g}(\vec{p}; z) = \mathbb{M} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon' \frac{A(\vec{p}; \epsilon')}{z - \epsilon'}, \quad z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \quad (3.15)$$

definiert zwei außerhalb der reellen Achse in der oberen bzw. unteren z-Halbebene analytische Funktionen, deren Randwertlimites mit g_r und g_a (für "avanciert" und "retardiert") bezeichnet werden:

$$g_r(\vec{p}; \epsilon) := \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \tilde{g}(\vec{p}; \epsilon + i\eta), \quad (3.16)$$

$$g_a(\vec{p}; \epsilon) := \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \tilde{g}(\vec{p}; \epsilon - i\eta). \quad (3.17)$$

Die "physikalische" Zweipunktfunktion gewinnt man durch

$$g(\vec{p}; \epsilon) = \theta(\epsilon - \epsilon_F) g_r(\vec{p}; \epsilon) + \theta(\epsilon_F - \epsilon) g_a(\vec{p}; \epsilon) \quad (3.18)$$

zurück; analoges gilt für die anderen Einteilchenfunktionen.

Zusammen mit der Dysongleichung (3.8) für komplexe Energien erhält man aus (3.12) und (3.15) einen expliziten Ausdruck für die Spektralfunktion:

$$A(\vec{p}; \epsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{-W(\vec{p}; \epsilon)}{(\epsilon - \frac{p^2}{2m} - \operatorname{Re} M(\vec{p}; \epsilon))^2 + W^2(\vec{p}; \epsilon)} . \quad (3.19)$$

W steht für den Imaginärteil des Massenoperators:

$$W(\vec{p}; \epsilon) := \operatorname{Im} \tilde{M}(\vec{p}; \epsilon + i\eta) = \frac{1}{2i} (\tilde{M}(\vec{p}; \epsilon + i\eta) - \tilde{M}(\vec{p}; \epsilon - i\eta)) . \quad (3.20)$$

Eine beträchtliche Vereinfachung erfahren die Gleichungen (3.14 und 19) in einem reinen Einteilchenmodell [Br72] wie etwa dem Schalenmodell mit einem Hartree-Fock-Potential oder dem Fermigas-Modell mit einem äußeren Potential. Hier ist der Realteil von M mit dem Hartree-Fock- oder dem äußeren Potential V_{ext} zu identifizieren, während der Imaginärteil vollständig verschwindet. Dies hat zur Folge, daß die Spektralfunktion A die Form einer δ -Funktion annimmt:

$$A^{1T}(\vec{p}; \epsilon) = \delta(\epsilon - \frac{p^2}{2m} - V_{\text{ext}}(\vec{p})) ; \quad (3.21)$$

der Einteilchenpropagator lautet in diesem Fall:

$$g^{1T}(\vec{p}; \epsilon) = \frac{\mathcal{N} \theta(\epsilon - \epsilon_F)}{\epsilon - \frac{p^2}{2m} - V_{\text{ext}}(\vec{p}) + i\eta} + \frac{\mathcal{N} \theta(\epsilon_F - \epsilon)}{\epsilon - \frac{p^2}{2m} - V_{\text{ext}}(\vec{p}) - i\eta} . \quad (3.22)$$

Das Bild der Einteilchenbewegung wird in der sog. Quasiteilchennäherung [Ki67, JLM76] beibehalten; dynamische Korrelationen zwischen den Teilchen werden jedoch berücksichtigt, indem eine Verteilung der Einteilchenstärke eines Eigenzustands des Systems auf mehrere Einteilchenzustände zugelassen ist. Dabei wird festgehalten, daß jeweils ein Einteilchenzustand existiert, der einen großen Überlapp mit dem Eigenzustand besitzt, so daß dieser mit den Quantenzahlen des dominanten Einteilchenzustands beschrieben werden kann und den Quasiteilchenzustand des Systems bildet.

Eine solche Formulierung entspricht der Beschreibung eines Einteilchenzustands mit Dämpfung [JLM76] und damit exakt dem Bild des optischen Modells, wie es einleitend erwähnt wurde. Die Quasiteilchennäherung ist mithin eine adäquate Näherung für die Untersuchung des optischen Potentials.

Für die Zweipunktfunktion bedeutet dies, daß in den Fällen, in denen sie in einem reellen Energieintegral auftritt, ihr entscheidender Beitrag aus dem Bereich des Quasiteilchenpols kommt und der Imaginärteil klein ist. Auf die Spektralfunktion wirkt sich das dahingehend aus, daß der Imaginärteil wieder als verschwindend angenommen werden kann; sie behält so die prinzipielle Form der δ -Funktion, erfährt jedoch eine Modifikation durch die Impulsverteilung $n(\vec{p})$, welche die Abweichung vom reinen Einteilchenmodell beschreibt:

$$A^{QT}(\vec{p}; \epsilon) = [\theta(\epsilon_F - \epsilon) n(\vec{p}) + \theta(\epsilon - \epsilon_F) (1 - n(\vec{p}))] \delta(\epsilon - E(\vec{p})) . \quad (3.23)$$

Hier repräsentiert der erste Term in der eckigen Klammer den Lochanteil und der zweite Term den Teilchenanteil der Spektralfunktion.

$n(\vec{p})$ ist durch (p_F : Fermimpuls; $p = |\vec{p}|$)

$$\bar{n}^{-1}(\vec{p}) := 1 - \frac{\partial}{\partial \epsilon} \operatorname{Re} M(\vec{p}; \epsilon) \Big|_{\epsilon=E(\vec{p})} ; \quad n = \begin{cases} \bar{n} & p < p_F \\ 1 - \bar{n} & p > p_F \end{cases} \quad (3.24)$$

gegeben, wobei

$$E(\vec{p}) := \frac{p^2}{2m} + \operatorname{Re} M(\vec{p}; E(\vec{p})) \quad (3.25)$$

die Einteilchenenergie bezeichnet.

Die Impulsverteilungsfunktion stellt eine wichtige Größe bei der Untersuchung von Kernmaterie dar, da sie ein Maß für die Energieabhängigkeit des effektiven Einteilchenpotentials ist. Über die Beziehung

$$\frac{\bar{m}(\vec{p})}{m} = \bar{n}^{-1}(\vec{p}) \quad (3.26)$$

hängt sie mit der sog. E-Masse $\bar{m}(\vec{p})$ zusammen [JLM76].

Bei den Zweiteilchenfunktionen Λ und K werden ebenfalls die analytischen Fortsetzungen untersucht. Für den Zweiteilchenpropagator ergibt sich aus (3.10) mit der Spektraldarstellung (3.14) der Zweipunktfunktion ($\vec{q} = \frac{\vec{p} + \vec{p}'}{2}$):

$$\Lambda(\vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = - \delta(\vec{p} - \vec{p}') \iint d\Omega d\omega A(\frac{\vec{P}}{2} + \vec{q}; \frac{\Omega}{2} + \omega) A(\frac{\vec{P}}{2} - \vec{q}; \frac{\Omega}{2} - \omega) \times$$

$$\left[\frac{\theta(\epsilon_F - \frac{\Omega}{2} - \omega) \theta(\epsilon_F - \frac{\Omega}{2} + \omega)}{\epsilon - \Omega - i\eta} - \frac{\theta(\frac{\Omega}{2} + \omega - \epsilon_F) \theta(\frac{\Omega}{2} - \omega - \epsilon_F)}{\epsilon - \Omega + i\eta} \right] . \quad (3.27)$$

Mit der Spektralfunktion

$$\lambda(\vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \Omega) = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \int d\omega A(\frac{\vec{P}}{2} + \vec{q}; \frac{\Omega}{2} + \omega) A(\frac{\vec{P}}{2} - \vec{q}; \frac{\Omega}{2} - \omega) \times$$

$$[\theta(\frac{\Omega}{2} + \omega - \epsilon_F) \theta(\frac{\Omega}{2} - \omega - \epsilon_F) - \theta(\epsilon_F - \frac{\Omega}{2} - \omega) \theta(\epsilon_F - \frac{\Omega}{2} + \omega)] \quad (3.28)$$

gilt die Darstellung:

$$\tilde{\lambda}(\vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; z) = \int d\Omega \frac{\lambda(\vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \Omega)}{z - \Omega} . \quad (3.29)$$

Zurück zum "physikalischen" Zweiteilchenpropagator gelangt man wieder

durch den Grenzübergang

$$\Lambda(\vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = \theta(\epsilon - 2\epsilon_F) \tilde{\lambda}(\vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon + i\eta) +$$

$$\theta(2\epsilon_F - \epsilon) \tilde{\lambda}(\vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon - i\eta) . \quad (3.30)$$

Entsprechendes gilt für die analytische Fortsetzung von K , die durch

$$\tilde{K}(\vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; z) = 2 \tilde{v}(\vec{p}, \vec{p}') + \iint d^3q d^3q' \tilde{v}(\vec{p}, \vec{q}) \tilde{\lambda}(\vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; z) \times$$

$$\tilde{K}(\vec{P}; \vec{q}', \vec{p}'; z) \quad (3.31)$$

definiert ist und für die man mit der Spektralfunktion

$$\kappa(\vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = -\frac{1}{2\pi i} (\tilde{K}(\vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon + i\eta) - \tilde{K}(\vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon - i\eta)) \quad (3.32)$$

eine der Gleichung (3.29) analoge Darstellung angeben kann [WW71].

Mittels der Gleichungen (3.9, 15, 32) läßt sich die folgende, für die weitere Behandlung günstige Form des Massenoperators finden:

$$\begin{aligned} \tilde{M}(\vec{p}; z) = & -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi i} \int d^3q \left[\tilde{K}(\vec{p} + \vec{q}; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}; \epsilon' + z) 2\pi i \theta(\epsilon_F - \epsilon') A(\vec{q}; \epsilon') + \right. \\ & \left. 2\pi i \theta(2\epsilon_F - \epsilon') \kappa(\vec{p} + \vec{q}; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}; \epsilon') \tilde{g}(\vec{q}; \epsilon' - z) \right]. \quad (3.33) \end{aligned}$$

Im Rahmen der Quasiteilchennäherung vereinfachen sich die Ausdrücke für Λ und M erheblich. Der Zweiteilchenpropagator nimmt dann die Gestalt

$$\begin{aligned} \tilde{\Lambda}(\vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; z) = & \delta(\vec{p} - \vec{p}') \frac{1}{z - E(\vec{q}_+) - E(\vec{q}_-)} [\theta(E(\vec{q}_+) - \epsilon_F) \theta(E(\vec{q}_-) - \epsilon_F) \times \\ & n_>(\vec{q}_+) n_>(\vec{q}_-) - \theta(\epsilon_F - E(\vec{q}_+)) \theta(\epsilon_F - E(\vec{q}_-)) \times \\ & n_<(\vec{q}_+) n_<(\vec{q}_-)] , \quad (3.34) \end{aligned}$$

$$n_<(\vec{q}) := n(\vec{q}), \quad n_>(\vec{q}) := 1 - n_<(\vec{q}); \quad \vec{q}_\pm := \frac{\vec{p}}{2} \pm \frac{\vec{p} + \vec{p}'}{2},$$

an, und der Massenoperator lautet wegen (3.33):

$$\begin{aligned} \tilde{M}(\vec{p}; z) = & \int d^3q \tilde{K}(\vec{p} + \vec{q}; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}; E(\vec{q}) + z) n_<(\vec{q}) \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})) - \\ & \int d\epsilon' \int d^3q \theta(2\epsilon_F - \epsilon') \kappa(\vec{p} + \vec{q}; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}; \epsilon') \times \\ & \frac{n_<(\vec{q}) \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})) + n_>(\vec{q}) \theta(E(\vec{q}) - \epsilon_F)}{z + E(\vec{q}) - \epsilon'}. \quad (3.35) \end{aligned}$$

3.3. Näherungen

In diesem Kapitel werden die in der Literatur üblichen Lösungsmethoden für die Gleichungen (3.7-10) bzw. (3.7,8, 3.34,35) skizziert. Man unterscheidet im wesentlichen zwischen zwei Klassen von Approximationen, den Brueckner- und den Λ -Theorien.

Die Λ -Theorien beruhen auf einem Funktionalformalismus (Puff-Martin-Schwinger- (PMS-) Methode) [MS59, Pu61], der es ermöglicht, systematisch Zweier-, Dreier-, Vierer- usw. Korrelationen zu berücksichtigen; im Rahmen einer "independent pair approximation" (s. z.B. [SF74]), d.h. der Beschränkung auf Zweierkorrelationen, wird man auf verschiedene Näherungen am Zweiteilchenpropagator geführt. Für einen Überblick wird auf [WW71] verwiesen, Kernmaterieuntersuchungen aus jüngerer Zeit im Rahmen dieser Methode sind [GWW75, MH78, WW85].

Die Λ^{00} -Version [RP63] ersetzt in Λ , Gl. (3.10), die beiden Einteilchenpropagatoren g durch die freien Propagatoren, behält jedoch die negative Fermienergie des selbstbindenden Systems bei:

$$g \ g \longrightarrow g_0 \ g_0 ,$$

$$g_0(\vec{p}; \epsilon) = \frac{\theta(\frac{p^2}{2m} - \epsilon_F)}{\epsilon - \frac{p^2}{2m} + i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \frac{p^2}{2m})}{\epsilon - \frac{p^2}{2m} - i\eta} . \quad (3.36)$$

Die K-Matrix der Λ^{00} -Theorie nimmt dadurch die Form der Streumatrix des Zweinukleonenproblems an; Effekte des Mediums, insbesondere des Pauliprinzipis, werden in einer veränderten Energie-Impuls-Beziehung berücksichtigt [PRW66].

Die Λ^{01} -Version [FF72] erreicht eine korrektere Beschreibung des Zweiteilchenpropagators dadurch, daß sie nur eine der beiden Einteilchen-

greenfunktionen in Λ durch den freien Propagator ersetzt (symbolisch):

$$g \ g \longrightarrow \frac{1}{2} (g_0 g + g g_0) . \quad (3.37)$$

Allerdings ist jetzt die Gleichung (3.7) für die K-Matrix über das effektive Einteilchenpotential mit den anderen Gleichungen (3.8,9) gekoppelt, was die praktische Rechnung erschwert.

Es ist festzuhalten, daß sich die Quasiteilchenform der Spektralfunktion (3.12) bei der Λ^{00} - und der Λ^{01} -Version automatisch ergibt (für Energien unterhalb der Fermikante), also nicht eine zusätzliche Annahme darstellt.

Keinerlei solcher Näherungen macht die Λ^{11} -Version; die Spektralfunktion nimmt infolgedessen die allgemeinere Form (3.19) an, was den Vorteil hat, daß mit der endlichen Breite der Spektralfunktion eine Abschätzung der Lebensdauer der Einteilchenzustände unterhalb der Fermikante gegeben werden kann. Ein weiterer Vorzug der Λ^{11} -Version besteht in ihrer "thermodynamischen Konsistenz". Dies besagt, daß der Gleichgewichtszustand des Systems eindeutig bestimmbar ist (Hugenholtz-van Hove-Theorem) [Ba62]. Die komplizierte Struktur der Gleichungen stellt jedoch für die praktische Behandlung eine ernsthafte Schwierigkeit dar, weswegen in der Literatur doch wieder auf mehr oder weniger einschränkende Näherungen zurückgegriffen wird, die die erwähnten Vorteile z.T. zunichte machen [BS66, HK74, WW85].

Die zweite Klasse von Näherungen bilden die verschiedenen Versionen der Bruecknertheorie; für einen Überblick wird auf die zusammenfassenden Artikel [Da67, Be71, JLM76] verwiesen. Obwohl die Bruecknertheorie (formal) nicht aus dem System der Leiternäherungsgleichungen gewonnen wird, sondern auf einer Analyse der Störungsreihe von Bethe-Goldstone basiert [Go57], lassen sich leicht die Vernachlässigungen an den Gleichungen

(3.7-10) angeben, die auf die Bruecknertheorie führen.

Es sind dies: a) die Annahme einer Fermigasverteilungsfunktion für die Impulsdichte $n(\vec{p})$ im Zweiteilchenpropagator Λ und der Faltungsgleichung (3.9):

$$n(\vec{p}) = \theta(\epsilon_F - E(\vec{p})), \quad (3.38)$$

sowie b) die Beschränkung auf reine Teilchen-Teilchen-Propagation in Λ .

Der vom Pauliprinzip herrührende Projektor N im Zähler des Zweiteilchenpropagators (3.34) ($\vec{q}_\pm = \frac{\vec{p}}{2} \pm \vec{q}$; $\epsilon_F = E(p_F)$, p_F : Fermiimpuls):

$$N(\vec{p}, \vec{q}, p_F) = \theta(E(\vec{q}_+) - \epsilon_F) \theta(E(\vec{q}_-) - \epsilon_F) - \theta(\epsilon_F - E(\vec{q}_+)) \theta(\epsilon_F - E(\vec{q}_-)) \quad (3.39)$$

wird daher zu

$$N^{Br}(\vec{p}, \vec{q}, p_F) = \theta(E(\vec{q}_+) - \epsilon_F) \theta(E(\vec{q}_-) - \epsilon_F) \quad (3.40)$$

abgeändert.

Die Bruecknertheorie hat damit die formale Struktur der Hartree-Fock-Theorie, in der die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung durch die K-Matrix ersetzt ist (daher auch die exaktere Bezeichnung als Brueckner-Hartree-Fock-Theorie (BHF)).

Begründet wird diese Approximation durch die folgenden Argumente [Ma76]:

In der störungstheoretischen Betrachtung des Massenoperators entspricht die BHF-Theorie der Partialaufsummation aller (Leiter-)Graphen, die nur eine Lochlinie enthalten (daher der Name "hole-line-expansion" [HM72]).

Bei der Berechnung dieser Graphen ist für die Lochlinie eine Impulsintegration von Null bis zum Fermiimpuls p_F durchzuführen, was einen Faktor p_F^3 ergibt, der seinerseits - bei unterstellter Fermigasbeziehung

$$\rho = \frac{2}{3\pi^2} p_F^3 \quad (3.41)$$

proportional zur Dichte ρ ist. Bei Kernmaterie, als einem System niedriger Dichte (vgl. die Argumentation in Kapitel 2.2.), ist daher die Annahme gerechtfertigt, daß der wesentliche Beitrag zum Massenoperator von denjenigen Graphen herrührt, die nur eine Lochlinie besitzen.

In Anhang A.2. wird gezeigt, daß eine wichtige Folge der Annahme b) darin besteht, daß der ganze zweite, durch die Spektralfunktion κ gegebene Term in (3.33) verschwindet. Auf diesen Punkt soll später noch näher eingegangen werden.

Die Gleichungen der so skizzierten, genauer als "Brueckner-Hartree-Fock-Näherung mit 'continuous choice' des Einteilchenpotentials" [JLM75] bezeichneten Version der Bruecknertheorie haben demnach folgende Gestalt:

$$\tilde{\kappa}^{\text{Br}}(\vec{p}; \vec{p}', z) = 2 \bar{v}(\vec{p}, \vec{p}') + \iint d^3q d^3q' \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \tilde{\lambda}^{\text{Br}}(\vec{p}; \vec{q}, \vec{q}'; z) \times \tilde{\kappa}^{\text{Br}}(\vec{p}; \vec{q}', \vec{p}'; z), \quad (3.42)$$

$$\tilde{\lambda}^{\text{Br}}(\vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; z) = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \frac{\theta(E(\vec{q}_+) - \epsilon_F) \theta(E(\vec{q}_-) - \epsilon_F)}{z - E(\vec{q}_+) - E(\vec{q}_-)}, \quad (3.43)$$

$$E(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + \text{Re } M^{\text{Br}}(\vec{p}; E(\vec{p})); \quad \vec{q}_{\pm} = \frac{\vec{p}}{2} \pm \frac{\vec{p} + \vec{p}'}{2}, \quad (3.44)$$

$$M^{\text{Br}}(\vec{p}; \epsilon) = \int d^3q \tilde{\kappa}^{\text{Br}}(\vec{p}; \vec{q}; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}; E(\vec{q}) + \epsilon + i\eta) \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})). \quad (3.45)$$

Mit einer weiteren Näherung, die darin besteht, die Einteilchenenergien im Zweiteilchenpropagator für Energien über der Fermikante durch die kinetischen Energien zu ersetzen, gelangt man zum sog. "gap choice" für das Einteilchenpotential [Be71]. Approximiert man zudem die Einteilchenenergien unterhalb der Fermikante durch ein Polynom zweiten Grades im Impuls

und setzt die Pauliprojektoren gleich Eins, so erhält man die "reference spectrum"-Methode [BBP63].

Durch die Hinzunahme des sog. Korrelationsterms, eines "2-Loch-Linien"-Beitrags, finden auch in der Bruecknertheorie Effekte Berücksichtigung, die auf einer von der Fermigasform abweichenden Impulsverteilung beruhen [JLM76]. In den Λ -Theorien sind solche Beiträge automatisch enthalten, da hier die Möglichkeit von Loch-Loch-Propagation im Zweiteilchenpropagator von vornherein zugelassen ist [We85]. Es zeigt sich allerdings, daß auch bei einer im Sinn der Λ -Theorien errechneten K -Matrix der Beitrag des Korrelationsgraphen zum Imaginärteil des Massenoperators - und damit des optischen Potentials - für Energien über der Fermikante verschwindet; der Realteil des Massenoperators erfährt dagegen in allen Energiebereichen eine Korrektur durch den Korrelationsbeitrag. Eine detaillierte Behandlung dieser Frage ist in Anhang A.2. zu finden.

Neben einer in allen derartigen Rechnungen üblichen Winkelmittelung über den Schwerpunktsimpuls in der Leitergleichung (3.7) [BG58] besteht die Vorgehensweise bei der expliziten Lösung des Problems darin, das (je nach Approximation verschiedene) Gleichungssystem (3.7-10) für eine ganze Schar von (vorzugebenden) Fermiimpulswerten p_F zu lösen; dasjenige Ergebnis, welches das jeweils gewählte Gleichgewichtskriterium (z.B. Maximum der Bindungsenergie pro Nukleon) erfüllt, liefert die Lösung des Problems. Als Resultat der Rechnung erhält man auf diese Weise (u.a.) eine Gleichgewichtsdichte und einen Gleichgewichtsfermiimpuls.

3.4. Übertragung auf endliche Kerne; Lokale-Dichte-Approximation (LDA)

Der letzte Schritt bei der Berechnung von Eigenschaften endlicher Kerne mit Hilfe der "Kernmaterie"-Methode besteht darin, die Resultate der Rechnung in geeigneter Weise mit einer Ortsabhängigkeit zu versehen. Es ist in der Literatur üblich, hierfür die Technik der "Lokalen-Dichte-Approximation" (LDA) anzuwenden.

Ursprünglich wurde sie von Brueckner et al. [BGW58, BLR61] eingeführt und später insbesondere von Negele [Ne70, Ne75] für die Berechnung von Grundzustandseigenschaften endlicher Kerne weiterentwickelt. In letzter Zeit haben mehrere Gruppen die LDA erfolgreich bei der Bestimmung des optischen Potentials auf der Grundlage der Brueckner-Hartree-Fock-Theorie angewandt [Sa76, JLM77b, BR77b, BR78a,b, GBR79].

Die grundlegende Näherung der LDA besteht in der Annahme, daß die Bedingungen an jedem Ort des endlichen Kerns dieselben sind wie in Kernmaterie mit der entsprechenden Dichte, so daß man lokal alle benötigten Größen wie in einer Kernmaterierechnung bestimmen kann. Diese Annahme ist im Kerninnern sicher gut erfüllt; doch auch für die Kernoberfläche handelt es sich aufgrund der Kurzreichweitigkeit der Kernkräfte um eine akzeptable Approximation [Ma79], deren Güte mit wachsender Projektilenergie zunimmt, weil die Wellenlänge des Projektils im Vergleich zu dem Bereich, in dem sich die Dichte in merklichem Ausmaß ändert, kleiner wird. Die LDA besitzt damit eine enge Verwandtschaft mit der Thomas-Fermi-Theorie, in der ebenfalls von lokal konstanten Mediumsverhältnissen ausgegangen wird, vgl. z.B. [RS80].

Da auch für Kernmaterie näherungsweise die Fermigasbeziehung (3.41) zwischen dem Fermiimpuls p_F und der Dichte ρ gilt und man in einer Kernma-

terierechnung eine ganze Schar von Lösungen für die verschiedenen (vorzugebenden) Fermiimpulse erhält, wird der Zusammenhang (3.41) ausgenutzt, um das Resultat der Kernmaterierechnung mit einer Ortsabhängigkeit zu versehen. Der Fermiimpuls wird mithin vorgegeben und im Verlauf der Rechnung festgehalten.

Wenn im weiteren in dieser Arbeit von der "Lokalen-Dichte-Näherung" (LDA) gesprochen wird, so ist darunter genauer die Annahme zu verstehen, daß im endlichen Kern an einem Ort r lokal das Gleichungssystem der Leiter-näherung in Kernmateriegestalt (3.7-10) gilt. Die beteiligten Größen besitzen dann eine parametrische Ortsabhängigkeit, die durch den Fermiimpuls vermittelt ist.

Diese von Mahaux [JLM77b] als "einfache" LDA bezeichnete Näherung ist relativ grob, da mit ihr nicht nur Vernachlässigungen an der effektiven Zweiteilchenwechselwirkung vorgenommen werden, sondern ebenfalls am Ein-teilchenpropagator und der Integralstruktur der Faltungsgleichung. Z.B. führt sie nicht auf den aus heuristischen Überlegungen gewonnenen Faltungsansatz für das optische Potential [Ho71]. Diesem Mangel wird in der Literatur auf verschiedene Weise begegnet.

Die Methode der "effektiven lokalen Kräfte" [BR77b, BR78a,b, GBR79] beschafft sich mit Hilfe verschiedener Mittelungsprozeduren eine lokale, in LDA berechnete K -Matrix und verwendet diese in einem Faltungsansatz für das optische Potential. Die in diesem Zusammenhang benötigte Dichtematrix wird in der Slater- (oder einer anderen) Approximation angesetzt [GBR79]. Bezüglich der Details dieser Methode wird auf Kapitel 4.3.2. und auf Anhang A.4. verwiesen.

In der sogenannten "verbesserten" LDA von Mahaux und Mitarbeitern [JLM77b, Ma79] wird die ungenügende Berücksichtigung der Dichte (bzw. der Dichtematrix) durch die LDA in der Faltungsgleichung mittels einer (semi-)phä-

nomenologischen Argumentation korrigiert; diese Vorgehensweise – von den Autoren selbst als "qualitativ" bezeichnet – wird in Kapitel 5.4. genauer diskutiert.

Allen Näherungen, die über die LDA hinausgehen, ist gemeinsam, daß sie die genannten Vernachlässigungen nur teilweise bzw. in phänomenologischer Weise kompensieren. Im weiteren Verlauf der Arbeit wird nun ein Formalismus entwickelt, der die systematische Erfassung dieser Korrekturen zur LDA ermöglicht.

4. Phasenraumdarstellung und semiklassische Entwicklung der Leiternäherung

Für eine über die LDA hinausgehende Beschreibung eines räumlich inhomogenen Systems, hier des endlichen Atomkerns, muß auf die vereinfachende Voraussetzung der Translationsinvarianz bei den Gleichungen der Leiternäherung (3.1-4) verzichtet werden. Da jedoch weiterhin die Kernmaterieergebnisse als Ausgangspunkt verwendet bzw. die durch die LDA gemachten Vernachlässigungen näher untersucht werden sollen, ist es auch nicht vorteilhaft, das Problem in der sich jetzt - wegen der neuen Symmetrie - anbietenden Drehimpulsdarstellung zu formulieren. Es ist vielmehr eine durch die LDA vorgegebene gemischte Orts-Impuls-Darstellung gesucht, die eine Entwicklung zuläßt, in der sich die LDA als "nullte" Ordnung ergibt und die Restterme als Korrekturen höherer Ordnung erscheinen. Mit Hilfe der Wignertransformation [Wi32, Ki33] läßt sich eine solche Phasenraumdarstellung der Leiternäherung finden.

Im ersten Kapitel wird zunächst die Wignertransformation sowie die Wigner-Kirkwood-Entwicklungsformel [Ki33] für ein Operatorprodukt eingeführt; es schließt sich die Phasenraumdarstellung (Wignerdarstellung) der Leiternäherung an. Die restlichen Kapitel erläutern das sich hieraus ergebende Entwicklungsschema.

Die Wigner-Kirkwood-Entwicklung wird aus historischen Gründen auch als "semiklassische" Entwicklung bezeichnet; der Name rührt daher, daß der Kommutator zweier nichtkommutierender Operatoren durch das Produkt der entsprechenden (klassischen) Funktionen dieser Observablen - der sog. "klassische" Limes - und eine Gradientenentwicklung der Funktionen dargestellt wird.

4.1. Wignertransformation; Wigner-Kirkwood-Entwicklung

Bei der Wignertransformation, d.h. dem Übergang zur gemischten Orts-Impulsdarstellung der Quantenmechanik, handelt es sich um eine spezielle Fouriertransformation der Orts- bzw. Impulsdarstellung eines Operators; es werden daher zunächst die Konventionen für die Fouriertransformation festgelegt. Es gilt:

$$f(\vec{p}_1 \dots \vec{p}_n, \vec{p}'_1 \dots \vec{p}'_n) = (2\pi\hbar)^{-3n} \int d^3r_1 \dots d^3r_n d^3r'_1 \dots d^3r'_n \times \\ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\sum_{j=1}^n \vec{r}_j \vec{p}_j - \sum_{j=1}^n \vec{r}'_j \vec{p}'_j\right)\right) f(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_n, \vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_n), \quad (4.1)$$

und für die Umkehrtransformation:

$$f(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_n, \vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_n) = (2\pi\hbar)^{-3n} \int d^3p_1 \dots d^3p_n d^3p'_1 \dots d^3p'_n \times \\ \exp\left(+\frac{i}{\hbar}\left(\sum_{j=1}^n \vec{r}_j \vec{p}_j - \sum_{j=1}^n \vec{r}'_j \vec{p}'_j\right)\right) f(\vec{p}_1 \dots \vec{p}_n, \vec{p}'_1 \dots \vec{p}'_n), \quad (4.2)$$

wobei die Funktion f von ihrer Fouriertransformierten durch die Art der Argumente (Ort oder Impuls) unterschieden wird.

Unter der Wignertransformierten eines Einteilchenoperators A , dessen Matrixelemente in der Ortsdarstellung mit

$$A(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | A | \vec{r}' \rangle \quad (4.3)$$

bezeichnet seien, versteht man den Ausdruck [RS80, Kap.13]:

$$A(\vec{R}, \vec{p}) = \int d^3s \, e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{s}} A\left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2}\right). \quad (4.4)$$

Dabei repräsentieren

$$\vec{R} = \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2} \quad \text{und} \quad \vec{s} = \vec{r} - \vec{r}' \quad (4.5)$$

die entsprechenden "Schwerpunkts"- und "Relativ"koordinaten.

Die Wignertransformierte eines Operators ist somit die Fouriertransformierte bzgl. der "Relativ"koordinate. Auch hier soll in der Bezeichnung der Funktion A nicht zwischen der Orts- und der Wignerdarstellung differenziert werden; der Unterschied ergibt sich aus den Argumenten. Da $A(\vec{R}, \vec{P})$ von den klassischen Phasenraumkoordinaten Ort und Impuls abhängt, wird die Wignerdarstellung auch Phasenraumdarstellung genannt.

Für die Matrixelemente des Operators A in Impulsdarstellung,

$$A(\vec{p}, \vec{p}') = \langle \vec{p} | A | \vec{p}' \rangle, \quad (4.6)$$

gilt in analoger Weise:

$$A(\vec{R}, \vec{P}) = \int d^3 q \, e^{i \vec{q} \vec{R}} A(\vec{p} + \frac{\vec{q}}{2}, \vec{p} - \frac{\vec{q}}{2}), \quad (4.7)$$

mit

$$\vec{P} = \frac{\vec{p} + \vec{p}'}{2}, \quad \vec{q} = \vec{p} - \vec{p}'. \quad (4.8)$$

Die jeweiligen Rücktransformationen zu (4.4) und (4.7) lauten:

$$A(\vec{r}, \vec{r}') = (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3 P \, e^{i \vec{P} \vec{S}} A(\vec{R}, \vec{P}), \quad (4.9)$$

$$A(\vec{p}, \vec{p}') = (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3 R \, e^{-i \vec{q} \vec{R}} A(\vec{R}, \vec{P}). \quad (4.10)$$

Von den diversen möglichen Wignertransformationen der Matrixelemente eines Zweiteilchenoperators B werden im weiteren die Transformierten bzgl. der Schwerpunktskoordinaten benötigt. Sind die Matrixelemente des Operators B in der Ortsdarstellung durch

$$B(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}'_1, \vec{r}'_2) \equiv \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | B | \vec{r}'_1, \vec{r}'_2 \rangle = B(\vec{R} + \frac{\vec{S}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{S}}{2}; \vec{r}, \vec{r}') \quad (4.11)$$

bzw. in der Impulsdarstellung durch

$$B(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}'_1, \vec{p}'_2) \equiv \langle \vec{p}_1, \vec{p}_2 | B | \vec{p}'_1, \vec{p}'_2 \rangle = B(\vec{p}_1 + \frac{\vec{q}}{2}, \vec{p}_2 - \frac{\vec{q}}{2}; \vec{p}', \vec{p}') \quad (4.12)$$

gegeben, so gilt für die entsprechenden Wignertransformierten in der Ortsdarstellung (bzgl. der Relativkoordinaten)

$$B(\vec{R}, \vec{p}; \vec{r}, \vec{r}') = \int d^3s e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{s}} B(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2}; \vec{r}, \vec{r}') \quad (4.13)$$

bzw. in der Impulsdarstellung (bzgl. der Relativkoordinaten)

$$B(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}') = \int d^3q e^{+\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{R}} B(\vec{p} + \frac{\vec{q}}{2}, \vec{p} - \frac{\vec{q}}{2}; \vec{p}, \vec{p}') , \quad (4.14)$$

wobei die Koordinatensätze

$$\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2} = \frac{1}{2}(\vec{r}'_1 + \vec{r}'_2); \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{r}' = \vec{r}'_1 - \vec{r}'_2 \quad (4.15)$$

bzw.

$$\vec{p} + \frac{\vec{q}}{2} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2), \quad \vec{p} - \frac{\vec{q}}{2} = \frac{1}{2}(\vec{p}'_1 + \vec{p}'_2); \quad \vec{p} = \vec{p}_1 - \vec{p}_2, \quad \vec{p}' = \vec{p}'_1 - \vec{p}'_2 \quad (4.16)$$

Verwendung finden.

Für die Wignertransformation des Produkts zweier (Einteilchen-)Operatoren A_1 und A_2 gilt die wichtige Wigner-Kirkwood-Entwicklungsformel [Ki33]:

$$(A_1 A_2)(\vec{R}, \vec{p}) = \int d^3s e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{s} \cdot \vec{p}} (A_1 A_2)(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{s}}{2}) \quad (4.17)$$

$$= [e^{-\frac{\hbar}{2i} (\vec{\nabla}_R \vec{\nabla}_{p'} - \vec{\nabla}_{p'} \vec{\nabla}_R)} A_1(\vec{R}, \vec{p}) A_2(\vec{R}', \vec{p}')]_{\vec{R}'=\vec{R}; \vec{p}'=\vec{p}} \quad (4.18)$$

$$(A_1 A_2)(\vec{r}, \vec{r}') := \langle \vec{r} | A_1 A_2 | \vec{r}' \rangle = \int d^3r'' A_1(\vec{r}, \vec{r}'') A_2(\vec{r}'', \vec{r}') \quad (4.19)$$

Eine Ableitung dieser Formel findet man z.B. bei [RS80, S.609].

Die Potenzreihenentwicklung der Exponentialfunktion mit dem Poissonklammeroperator $(\nabla_r \nabla_{p'} - \nabla_{p'} \nabla_r)$ liefert als ersten Term den "klassischen" Limes $A_1 \times A_2$, während in den Restgliedern der Entwicklungsreihe die (in der Regel geltende) Nichtkommutativität der beiden Operatoren ihren Niederschlag findet.

4.2. Phasenraumdarstellung der Gleichungen der Leiternäherung

4.2.1. Die Gleichungen

In Impulsdarstellung lauten die Gleichungen der Leiternäherung in ihrer allgemeinen, die Translationsinvarianz nicht ausnützenden Form (vgl. (3.1-4)):

$$K(\vec{P}, \vec{P}'; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = 2 \delta(\vec{P} - \vec{P}') \bar{v}(\vec{p}, \vec{p}') + \iint d^3q d^3q' \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \times \\ \int d^3Q \Lambda(\vec{P}, \vec{Q}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K(\vec{Q}, \vec{P}'; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon), \quad (4.20a)$$

$$\int d^3q \left[\left(\epsilon - \frac{p^2}{2m} \right) \delta(\vec{p} - \vec{q}) - M(\vec{p}, \vec{q}; \epsilon) \right] g(\vec{q}, \vec{p}'; \epsilon) = M \delta(\vec{p} - \vec{p}'), \quad (4.20b)$$

$$M(\vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\eta\epsilon'} \iint d^3q d^3q' \times \\ K(\vec{p} + \vec{q}, \vec{p}' + \vec{q}'; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}' - \vec{q}'}{2}; \epsilon + \epsilon') g(\vec{q}', \vec{q}; \epsilon'), \quad (4.20c)$$

$$\Lambda(\vec{P}, \vec{P}'; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = \frac{i}{\hbar} \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} g(\frac{\vec{P}}{2} + \vec{p}, \frac{\vec{P}'}{2} + \vec{p}'; \frac{\epsilon}{2} + \epsilon') g(\frac{\vec{P}}{2} - \vec{p}, \frac{\vec{P}'}{2} - \vec{p}'; \frac{\epsilon}{2} - \epsilon'), \quad (4.20d)$$

wobei die Transformation auf Schwerpunkts- und Relativkoordinaten (3.5) bereits vorgenommen wurde.

Mit Hilfe der Wignertransformation, der Wigner-Kirkwood-Formel und Gradientenentwicklungen, die der Wigner-Kirkwood-Formel ähneln, lassen sich die Leiternäherungsgleichungen in der Phasenraumdarstellung formulieren:

$$K(\vec{R}, \vec{P}; \vec{r}, \vec{r}'; \epsilon) = 2 \bar{v}(\vec{r}, \vec{r}') + \iint d^3q d^3q' \bar{v}(\vec{r}, \vec{q}) \left[e^{-\frac{\hbar}{2i} (\nabla_R \nabla_{P'} - \nabla_P \nabla_{R'})} \right. \\ \left. \Lambda(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K(\vec{R}', \vec{P}'; \vec{q}', \vec{r}'; \epsilon) \right]_{\vec{R}' = \vec{R}; \vec{P}' = \vec{P}}, \quad (4.21a)$$

$$\left[e^{-\frac{\hbar}{2i}(\nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{p}'} - \nabla_{\mathbf{p}} \nabla_{\mathbf{r}'})} \left(\epsilon - \frac{p^2}{2m} - M(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) \right) g(\vec{r}', \vec{p}'; \epsilon) \right]_{\vec{r}'=\vec{r}; \vec{p}'=\vec{p}} = M, \quad (4.21b)$$

$$M(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\eta\epsilon'} \int d^3q \left[e^{\frac{\hbar}{4i}(\nabla_{\mathbf{q}}, -\nabla_{\mathbf{q}'})} (\nabla_{\mathbf{p}'} + 2\nabla_{\mathbf{p}}) \times \right. \\ \left. K(\vec{r}', \vec{p}+\vec{q}; \vec{q}', \vec{q}'; \epsilon+\epsilon') g(\vec{r}, \vec{q}; \epsilon') \right]_{\vec{q}'=\vec{q}''=\frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \vec{p}'=\vec{p}, \vec{r}'=\vec{r}}, \quad (4.21c)$$

$$\Lambda(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = \left[\delta(\vec{p}-\vec{p}') e^{\frac{\hbar}{4i}(\overleftarrow{\nabla}_{\mathbf{p}} - \overrightarrow{\nabla}_{\mathbf{p}'})} (\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'}) \right] \frac{i}{\hbar} \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} g(\vec{r}, \frac{\vec{p}}{2} + \vec{q}; \frac{\epsilon}{2} + \epsilon') \times \\ g(\vec{r}', \frac{\vec{p}}{2} - \vec{q}; \frac{\epsilon}{2} - \epsilon') \Big]_{\vec{q}=\vec{p}; \vec{r}=\vec{r}'=\vec{R}}. \quad (4.21d)$$

Zur Umformung der Gleichungen zieht man dieselben Techniken heran, wie sie zum Beweis der Wigner-Kirkwood-Formel benutzt werden. Als Beispiel ist die Transformation der Faltungsgleichung (4.20c) in Anhang A.3. explizit angegeben.

Eine Besonderheit stellt der Zweiteilchenpropagator (4.21d) dar; er ist als Differentialoperator zu verstehen. Die Impulsgradienten wirken auf die rechts und links der eckigen Klammer stehenden Funktionen (hier der K-Matrix), was durch Pfeile über den Nablaoperatoren angedeutet ist.

Die Gleichungen (4.21a-d) stellen den Ausgangspunkt der weiteren Untersuchung dar. An einigen Stellen wird jedoch auch das analoge Gleichungssystem in der Ortsdarstellung (für die Relativkoordinaten der Zweiteilchengrößen) benötigt. Es lautet:

$$K(\vec{R}, \vec{p}; \vec{r}, \vec{r}'; \epsilon) = 2 \bar{v}(\vec{r}, \vec{r}') + \iint d^3s d^3s' \bar{v}(\vec{r}, \vec{s}) \left[e^{-\frac{\hbar}{2i}(\nabla_{\mathbf{R}} \nabla_{\mathbf{p}'} - \nabla_{\mathbf{p}} \nabla_{\mathbf{R}'})} \right. \\ \left. \Lambda(\vec{R}, \vec{p}; \vec{s}, \vec{s}'; \epsilon) K(\vec{R}', \vec{p}'; \vec{s}', \vec{r}'; \epsilon) \right]_{\vec{R}'=\vec{R}; \vec{p}'=\vec{p}}, \quad (4.22a)$$

$$\Lambda(\vec{R}, \vec{p}; \vec{r}, \vec{r}'; \epsilon) = \frac{i}{M} \int \frac{d\epsilon'}{2\pi M} (2\pi M)^{-3} \int d^3 q e^{\frac{i}{M} \vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')} g(\vec{R} + \frac{\vec{r}+\vec{r}'}{4}, \frac{\vec{p}}{2} + \vec{q}; \frac{\epsilon}{2} + \epsilon') \times$$

$$g(\vec{R} - \frac{\vec{r}+\vec{r}'}{4}, \frac{\vec{p}}{2} - \vec{q}; \frac{\epsilon}{2} - \epsilon'), \quad (4.22b)$$

$$M(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi M} e^{i\eta\epsilon'} \int d^3 q (2\pi M)^{-3} \int d^3 r' d^3 s e^{\frac{i}{M}(\vec{q}-\vec{p})\frac{\vec{s}}{2}} \times$$

$$[K(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}, \vec{p}+\vec{q}; \vec{r}-\vec{r}', \frac{\vec{s}}{2}, \vec{r}-\vec{r}', -\frac{\vec{s}}{2}; \epsilon+\epsilon') g(\vec{r}', \vec{q}; \epsilon')]. \quad (4.22c)$$

Die Dysongleichung behält die Form (4.21b).

4.2.2. Das Entwicklungsschema

Die Phasenraumformulierung (4.21) der Leiternäherung ist der allgemeinen Impulsraumformulierung (4.20) äquivalent. Sie stimmt für das Kernmaterieproblem mit den üblichen Kernmateriegleichungen (3.7-10) überein, eine Lösung erscheint jedoch ansonsten schwieriger als für die ursprüngliche Impulsraumformulierung. Allerdings führt die Vernachlässigung aller Exponentialfunktionen mit den Differentialoperatoren - das entspricht einer Taylorentwicklung mit Abbruch nach dem führenden Glied ($= 1$ für die e-Funktion) - auf die LDA-Version der Leiternäherung insofern, als zum einen weiterhin die Gleichungen des Kernmaterieproblems gelten, zum anderen jedoch zusätzlich alle Größen in parametrischer Weise vom Ort R abhängen (vgl. die Charakterisierung der LDA in Kapitel 3.4.). Daraus läßt sich schließen, daß mit den weiteren Termen einer Taylorentwicklung der Exponentialfunktionen in systematischer Weise Korrekturen zur LDA-Version gewonnen werden können; die Ordnung der Korrektur ergibt sich dabei einfach aus der Ordnung des Taylorentwicklungsgliedes. Solche Entwicklungen sind in der Literatur in der einen oder anderen Form schon seit langer Zeit bekannt, z.B. [Ki33, BB61, GV79], und werden bisweilen aufgrund des Auftretens des Faktors $\hbar$ in der Exponentialfunktion als $\hbar$ -Entwicklungen der jeweiligen Funktionen angesehen. Dagegen muß festgehalten werden, daß es sich bei der hier beschriebenen Entwicklung um eine Taylorentwicklung der Exponential-Differentialoperatoren handelt, die das Produkt zweier Operatoren beschreibt - und damit letztlich um die Erfassung der Nichtkommutativität von Orts- und Impulsoperatoren. Am deutlichsten kommt dies darin zum Ausdruck, daß der Faktor $1/\hbar$ in der Gleichung für Λ , der von der störungstheoretischen Entwicklung (i.e. der Beschränkung auf Zweierkorrelationen) herrührt, keinerlei Einfluß auf die

Entwicklung besitzt [Ba61]; ebenso wenig darf der Faktor $\mathbb{M}$ auf der linken Seite der Dysongleichung (4.21b) beachtet werden.

Behält man diese Einteilung im Sinn, so lassen sich die $\mathbb{M}$ aus den Exponentialfunktionen als Ordnungsparameter heranziehen und die beteiligten Größen formal als Potenzreihen in diesen $\mathbb{M}$ schreiben. Da diese Vorgehensweise in der Literatur üblich ist, soll sie auch hier beibehalten werden; die Gefahr einer Verwechslung mit den anderen noch auftretenden $\mathbb{M}$ ist, wie sich zeigen wird, nicht gegeben.

In symbolischer Schreibweise gilt:

$$\mathbb{M} = \sum_{i=0}^{\infty} \mathbb{M}^i \mathbb{M}^{(i)}; \quad g = \mathbb{M} \sum_{i=0}^{\infty} \mathbb{M}^i g^{(i)}; \quad (4.23a,b)$$

$$\Lambda = \sum_{i=0}^{\infty} \mathbb{M}^i \Lambda^{(i)}; \quad K = \sum_{i=0}^{\infty} \mathbb{M}^i K^{(i)}. \quad (4.24a,b)$$

Das $\mathbb{M}$ vor der Summe im Ausdruck für den Einteilchenpropagator g ist eine Konvention, welche die weitere Darstellung vereinfacht.

Die Korrekturen zur LDA gewinnt man nun auf natürliche Weise durch Einsetzen der " $\mathbb{M}$ -Potenzreihenentwicklungen" (4.23,24) und Taylorentwicklung der Exponential-Differentialoperatoren in den verschiedenen Gleichungen (4.21a-d). Die Differentialoperatoren treten dabei so auf, daß die Vorgehensweise für die explizite Berechnung der höheren Ordnungen selbst-evident ist.

Eine Ausnahme bildet die Dysongleichung (4.21b), für die eine Art Inversion vorzunehmen ist. Im nächsten Kapitel wird daher die Konstruktion der Korrekturen zur LDA-Einteilchengreenfunktion mittels der Dysongleichung explizit behandelt.

Eine weitere Schwierigkeit stellt der Umstand dar, daß der Integralgleichungscharakter der Leitergleichung auch in den Korrekturordnungen erhalten bleibt, also in jeder Ordnung erneut (immer kompliziertere) Integralgleichungen zu lösen sind. Wünschenswert wäre hingegen, eine Entwicklung zu besitzen, mit der die Korrekturen durch einfache Differentiationen und/oder Quadraturen einmal errechneter (LDA-) Größen bestimmt werden können. Wie dieses Ziel mittels eines ungeordneten Iterationsschemas erreicht werden kann, wird im anschließenden Kapitel 4.2.4. beschrieben.

Mit einer solchen Formulierung lassen sich dann auch andere effektive Kernmaterie-Wechselwirkungen in die Theorie einbauen, z.B. die in Kapitel 4.3.2. beschriebenen "lokalen effektiven Kräfte".

4.2.3. Die semiklassische Entwicklung der Dysongleichung

Die semiklassische Entwicklung der Einteilchengreenfunktion geht von der Dysongleichung (4.21b) für komplexe Energieargumente aus:

$$\left[e^{-\frac{\hbar}{2i}(\nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{p}'} - \nabla_{\mathbf{p}} \nabla_{\mathbf{r}'})} \left(z - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - M(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{p}}; z) \right) g(\vec{\mathbf{r}}', \vec{\mathbf{p}}'; z) \right]_{\vec{\mathbf{r}}' = \vec{\mathbf{r}}; \vec{\mathbf{p}}' = \vec{\mathbf{p}}} = \hbar \quad (4.25)$$

und wird nach der von Grammaticos und Voros [GV79] angegebenen Methode vorgenommen.

Neben den bereits eingeführten formalen Potenzreihenentwicklungen (4.23) und (4.24) sei zusätzlich die Funktion

$$H(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{p}}; z) := z - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - M(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{p}}; z), \quad (4.26)$$

$$H = \sum_{i=0}^{\infty} \hbar^i H^{(i)} = z - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \sum_{i=0}^{\infty} \hbar^i M^{(i)} \quad (4.27)$$

definiert.

Wegen der Symmetrie der Dysongleichung läßt sich (4.25) damit in folgender Weise schreiben:

$$\left[e^{-\frac{\hbar}{2i}(\nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{p}'} - \nabla_{\mathbf{p}} \nabla_{\mathbf{r}'})} \frac{1}{2} (H(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{p}}; z) g(\vec{\mathbf{r}}', \vec{\mathbf{p}}'; z) + g(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{p}}; z) H(\vec{\mathbf{r}}', \vec{\mathbf{p}}'; z)) \right]_{\vec{\mathbf{r}}' = \vec{\mathbf{r}}; \vec{\mathbf{p}}' = \vec{\mathbf{p}}} = \hbar. \quad (4.28)$$

Setzt man (4.23,27) in (4.28) ein, entwickelt die Differentialoperatoren und betrachtet einzeln jeweils die Terme, die dieselbe Potenz in $\hbar$ besitzen, dann erhält man die Entwicklungsterme von g in Abhängigkeit von

den $M^{(i)}$. Bezüglich der technischen Details der Entwicklung wird auf die Arbeit von [GV79] verwiesen. Die dort dargestellte Vorgehensweise ist hier geringfügig verallgemeinert, da Grammaticos und Voros das Einteilchenpotential (= Massenoperator) als fest vorgegeben annehmen und daher nicht in Form einer Potenzreihe ansetzen.

Wie kompliziertere Potentialeigenschaften - etwa Spin-/Isospinabhängigkeit - in diesem Entwicklungsschema berücksichtigt werden können, haben die genannten Autoren in einer weiteren Arbeit gezeigt [GV80].

Im weiteren Verlauf werden die Entwicklungsterme des Einteilchenpropagators bis zur zweiten Ordnung benötigt. Sie lauten:

$$g^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; z) = \frac{1}{H^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; z)}, \quad (4.29a)$$

$$g^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}; z) = \frac{M^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}; z)}{(H^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; z))^2}, \quad (4.29b)$$

$$g^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; z) = -\frac{1}{H^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; z)} \left\{ -\frac{(M^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}; z))^2}{(H^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; z))^2} - \frac{M^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; z)}{H^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; z)} - \frac{1}{8} D_D^{(2)}(H^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; z) g^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; z)) \right\}; \quad (4.29c)$$

$D_D^{(2)}$ ist in folgender Weise definiert:

$$D_D^{(2)}(A(\vec{r}, \vec{p})B(\vec{r}, \vec{p})) := (\nabla_{\vec{r}} \nabla_{\vec{p}'} - \nabla_{\vec{p}} \nabla_{\vec{r}'})^2 A(\vec{r}, \vec{p}) B(\vec{r}', \vec{p}') \Big|_{\substack{\vec{r}'=\vec{r} \\ \vec{p}'=\vec{p}}}. \quad (4.29d)$$

(4.29a) ist die Gleichung, die für die Zweipunktfunktion des homogenen Systems, also für Kernmaterie bzw. die LDA-Näherung, gilt. Die Korrekturen $g^{(1)}$ und $g^{(2)}$ hängen zum einen von den Korrekturen $M^{(1)}$ und $M^{(2)}$ des Massenoperators selbst ab und zum anderen von Orts- und Impulsableitungen des Massenoperators und des Einteilchenpropagators in LDA-Näherung. Es

wird sich später zeigen, daß diese Ausdrücke Gradienten- und Krümmungskorrekturen durch das Einteilchenpotential und die Dichte liefern. Des weiteren ist der Umstand zu beachten, daß mit wachsender Korrekturordnung die Potenzen des Energienenners $(H^{(0)})^{-1}$ größer werden. In der Auswertung der Faltungsgleichung (4.21c) führt dieser Sachverhalt zu Energieableitungen der K-Matrix, die auf diese Weise in die Korrekturen des optischen Potentials eingehen.

Die weitere Entwicklung der Ausdrücke für $g^{(1)}$ und $g^{(2)}$ ist in Anhang A.5. zu finden; ebenso ist dort die in diesem Zusammenhang in der Literatur übliche Impulswinkelmittelung beschrieben.

4.2.4. Umordnung des Iterationsschemas für die Leitergleichung

Die Formulierung der Leitergleichung in der Gestalt (4.21a), d.h. als Integralgleichung mit der freien Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung $\bar{v}$, läßt eine Entwicklung von K nur derart zu, daß für jede Korrekturordnung erneut eine Integralgleichung zu lösen ist. Dieser Umstand erschwert stark eine numerische Behandlung. Andererseits läßt sich die Lösung für das homogene System relativ leicht finden; man hat dann den Standard-Kernmateriefall und damit die nullte Ordnung der semiklassischen Entwicklung vorliegen. Es ist daher vorteilhaft, die Gleichung (4.21a) aufzuspalten in die Lösung des Kernmaterieproblems (in symbolischer Schreibweise):

$$K^{(0)} = 2\bar{v} + \bar{v}_A^{(0)} K^{(0)} \quad (4.30)$$

und eine weitere Iterationsgleichung für K , allerdings mit $K^{(0)}$ anstelle von $\bar{v}$. Die Standardtechnik für diese Vorgehensweise besteht darin, die ursprüngliche Gleichung (4.21a) mittels (4.30) und der Propagatordifferenz $\Lambda - \Lambda^{(0)}$ umzuformulieren, wobei im vorliegenden Fall zusätzlich berücksichtigt werden muß, daß der Propagator Λ ein Differentialoperator ist. Man erhält schließlich anstelle von (4.21a) die beiden Gleichungen:

$$K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = 2\bar{v}(\vec{p}, \vec{p}') + \iint d^3q d^3q' \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) \times \\ K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon), \quad (4.31)$$

$$K(\vec{R}, \vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) + \frac{1}{2} \iint d^3q d^3q' K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) \times \\ \left\{ \left[e^{-\frac{\hbar}{2i}(\nabla_R \nabla_{P'} - \nabla_{P'} \nabla_R)} \Lambda(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon) \right]_{\vec{R}'=\vec{R}; \vec{P}'=\vec{P}} - \right.$$

$$\Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon) \Big]. \quad (4.32)$$

Die Ortsdarstellung (für die Relativkoordinaten) ergibt sich in analoger Weise, vgl. (4.21a) und (4.22a).

Die vollständige Herleitung der Gleichungen (4.31,32) findet sich in Anhang A.6..

4.3. Andere Entwicklungsschemata

Vor der Diskussion der für eine weitere Behandlung notwendigen Näherungen in Kapitel 4.4. sollen einige aus der Literatur bekannte Approximationen dargestellt werden, die in der Phasenraumdarstellung der Leiternäherung bzw. ihrer semiklassischen Entwicklung als Spezialfälle enthalten sind.

4.3.1. Die Erweiterte-Thomas-Fermi (ETF) - Theorie

Die Leiterapproximation umfaßt als Spezialfall die Hartree-Fock-Näherung, vgl. Kapitel 2.2.. Diese entsteht durch Verwendung der freien anstelle der effektiven Wechselwirkung [WW71]. In analoger Weise beinhaltet die semiklassische Entwicklung der Leiternäherung auch die semiklassischen Approximationen zur Hartree-Fock-Theorie.

Hierzu gehören die Theorie von Baraff und Borowitz [BB61], die ETF-Theorie [Ki67, JB75, GV79] und darauf aufbauende Weiterentwicklungen wie die "M-Resummations"-Methode [DBS78, DSB80, BDB84] bzw. Verfeinerungen wie der Energiefunktionalformalismus [Ki67, BJC76, GV79]; ein Überblick ist in [RS80, Kap.13.] zu finden. Da in der vorliegenden Arbeit später auf die ETF-Approximation zurückgegriffen wird, soll diese Theorie hier kurz dargestellt werden.

Ersetzt man im Gleichungssystem (4.21) die K-Matrix durch die freie Wechselwirkung $\bar{v}$, so erhält man die Phasenraumdarstellung der Hartree-Fock-Theorie; die Leitergleichung (4.21a) verschwindet, und es verbleiben:

$$\left[e^{-\frac{\hbar}{2i}(\nabla_r \nabla_{p'} - \nabla_{p'} \nabla_r)} \left(\epsilon - \frac{p^2}{2m} - M^{\text{HF}}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) \right) \times \right. \\ \left. g^{\text{HF}}(\vec{r}', \vec{p}'; \epsilon) \right]_{\vec{r}'=\vec{r}; \vec{p}'=\vec{p}} = M, \quad (4.33)$$

$$M^{HF}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\epsilon'\tau} \int d^3q \left[e^{\frac{\hbar}{4i} 2\nabla_p (\nabla_{q'} - \nabla_{q''})} \times \right. \\ \left. 2\bar{v}(\vec{q}', \vec{q}'') g^{HF}(\vec{p}, \vec{q}; \epsilon') \right]_{\vec{p}=\vec{r}; \vec{q}'=\vec{q}''=\frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}} \quad (4.34)$$

Da die Zweiteilchenwechselwirkung reell und energieunabhängig ist, gilt dies ebenfalls für das effektive Einteilchenpotential. Die Energieintegration in der Faltungsgleichung (4.34) betrifft nur die Einteilchengreenfunktion und läßt sich leicht durchführen.

Die ETF-Theorie betrachtet das effektive Einteilchenpotential M^{HF} jedoch als fest vorgegeben - daher in der formalen Entwicklung auch als unabhängig von $\hbar$ - und entwickelt nur die Dysongleichung (4.33), wie es in Kapitel 4.2.3. beschrieben ist. Dies führt auf eine einfachere Form der Entwicklungsterme für die Zweipunktfunktion. Bis zur 2. Ordnung entwickelt lauten sie [GV79]:

$$g^{(0)-ETF}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = \frac{1}{H^{(0)-HF}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon)}, \quad (4.35)$$

$$H^{(0)-HF}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = \epsilon - \frac{p^2}{2m} - M^{(0)-HF}(\vec{r}, \vec{p}), \quad (4.36)$$

$$g^{(1)-ETF}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = 0, \quad (4.37)$$

$$g^{(2)-ETF}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = \frac{1}{8} g^{(0)-ETF}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) D_D^{(2)}(H^{(0)-HF}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) \times \\ g^{(0)-ETF}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon)). \quad (4.38)$$

Mit Hilfe von Energie- und Impulsintegrationen über g lassen sich dann die Korrekturen zur Thomas-Fermi-Version der Dichte bzw. der Dichtematrix finden, z.B. [RS80]:

$$n^{ETF}(\vec{r}, \vec{p}) = \theta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{p})) - \hbar^2 \left\{ \left[\frac{1}{2} B_2(\vec{r}, \vec{p}) \frac{\partial^2}{\partial \epsilon^2} + \frac{1}{6} B_3(\vec{r}, \vec{p}) \frac{\partial^3}{\partial \epsilon^3} \right] \times \right.$$

$$\theta(\epsilon_F(r) - \epsilon) \Big|_{\epsilon = E(\vec{r}, \vec{p})} , \quad (4.39)$$

$$(E(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + M^{(0)-HF}(\vec{r}, \vec{p})) .$$

Der erste Term in (4.39) entspricht der Thomas-Fermi-Dichtematrix. Die explizite Form der Koeffizientenfunktionen B_2 und B_3 ist in Anhang A.5. angegeben.

Eine Schwierigkeit in der ETF-Theorie stellt der Umstand dar, daß die Korrekturen der Dichte am klassischen Umkehrpunkt divergieren [RS80]. Der Grund hierfür liegt darin, daß das effektive Einteilchenpotential nicht selbstkonsistent errechnet wird. Dies läßt sich leicht ersehen, wenn man es als Funktional der Dichte ansetzt, wie es z.B. von Hartree-Fock-Rechnungen mit Skyrme-Kräften [VB72] her bekannt ist. Die Koeffizienten mit den Potentialableitungen in den Korrekturtermen (s. Anhang A.5.) beseitigen dann die Singularität (vgl. hierzu auch [HS85a]).

4.3.2. Die Methode der "lokalen effektiven Kräfte"

Die bereits in Kapitel 3.4. erwähnte Verwendung von lokalen effektiven Kräften [BR77a,b, BR78a,b, BGR78, GBR79, LF81] bei der Bestimmung des optischen Potentials für endliche Kerne geht über die LDA hinaus, indem folgender Faltungsansatz gemacht wird (daher auch der Name "folded microscopic interactions") [GBR79]:

$$M(\vec{r}, E) = \iint d^3x d^3s \int_0 (p_F(r)x/\hbar) \hat{v}(\vec{x}-\vec{s}, \vec{r}-\frac{\vec{x}-\vec{s}}{2}; E) \times \\ \rho(\vec{r}+\vec{s}, \vec{r}+\vec{s}-\vec{x}) [\delta(\vec{x}) - \delta(\vec{s})] \quad (4.40)$$

$\hat{v}$ und ρ bezeichnen die lokale effektive Kraft und die Dichtematrix; die beiden δ -Funktionen berücksichtigen den Unterschied zwischen direktem und Austauschterm.

Der Faltungsansatz (4.40) ist als Spezialfall in der Leiternäherung enthalten, weicht jedoch von der semiklassischen Entwicklung ab. Während der Einteilchenpropagator und die Zweiteilchenwechselwirkung in LDA-Näherung behandelt werden, wird die Faltungsgleichung in ihrer vollständigen Form (4.22c) belassen. Die korrekte Behandlung der Faltungsgleichung wird durch den Umstand ermöglicht, daß die in einer mikroskopischen Kernmaterierechnung gewonnene K-Matrix durch verschiedene Mittelungs- und Näherungsprozeduren in eine lokale effektive Kraft überführt wird; bzgl. der Details wird auf Anhang A.4. und die dort zitierte Literatur verwiesen.

Der Vorteil dieser Vorgehensweise ist aus (4.22c) ersichtlich: Die Verwendung einer lokalen Wechselwirkung (nur der Radialanteil ist notiert):

$$K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; r, r'; \epsilon) \longrightarrow \frac{\delta(r-r')}{rr'} v(r; \vec{R}, \vec{P}; \epsilon) \quad (4.41)$$

reduziert die Zahl der Ortsraumintegrationen und macht eine semiklassische Entwicklung der Gleichung überflüssig (und inadäquat):

$$M(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = \int \frac{d\epsilon'}{2\pi i \hbar} e^{i n \epsilon'} (2\pi \hbar)^{-3} \int d^3 q d^3 r' \vartheta(|\vec{r} - \vec{r}'|; \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}, \vec{p} + \vec{q}; \epsilon + \epsilon') \times \\ g(\vec{r}', \vec{q}; \epsilon') . \quad (4.42)$$

Das lokal-äquivalente, energieabhängige optische Potential aus (4.40) ergibt sich schließlich durch Anwendung einer lokalen Impulsapproximation (s. Anhang A.4.).

Das Verfahren ist nicht selbstkonsistent, da die Dichtematrix nicht aus der Dysongleichung (4.21b) gewonnen, sondern um eine Diagonaldichte entwickelt wird, die Hartree-Fock-Rechnungen oder phänomenologischen Parametrisierungen entnommen ist.

Da der Einteilchenpropagator bzw. die Dichtematrix und die K-Matrix nur in LDA-Näherung eingehen, läßt sich auch die Methode der "lokalen effektiven Kräfte" durch Berücksichtigung der Korrekturen, die durch die semiklassische Entwicklung der Dyson- und der Leitergleichung entstehen, verbessern. Wie in diesem Fall im einzelnen vorzugehen ist, wird für ein einfaches Beispiel in Anhang A.4. beschrieben.

4.4. Die semiklassische Entwicklung bis zur 2. Ordnung

Mit dem in Kapitel 4.2. angegebenen Entwicklungsschema lassen sich die Korrekturen zur LDA-Version der Leiternäherung in systematischer Weise gewinnen. In diesem Kapitel sollen nun die ersten Korrekturen näher untersucht werden. Zu diesem Zweck muß die Gradientenentwicklung bis zur 2. Ordnung durchgeführt werden, da sich die 1. Ordnung als verschwindend herausstellt.

In Kapitel 4.4.1. wird das Gleichungssystem (4.21) konsequent bis zur 2. Ordnung entwickelt. Es zeigt sich, daß die Vielzahl der Terme und - bedeutend schwerwiegender - der Umstand, daß die Gleichungen der Korrekturordnungen weiterhin gekoppelt bleiben, eine genauere Untersuchung mit dem Ziel der Vereinfachung unumgänglich machen. In den Kapiteln 4.4.2. und 4.4.3. werden einige einfache und plausible Näherungen beschrieben, mit deren Hilfe die Gleichungen zum einen entkoppelt und zum anderen im Umfang auf ein praktikables Maß begrenzt werden.

4.4.1. Die Gleichungen

Um eine kompakte und übersichtliche Darstellung zu ermöglichen, soll zunächst eine abkürzende Matrixschreibweise vereinbart werden, mit der das Gleichungssystem (4.21b,c,d,31,32) folgendes Aussehen hat:

$$K = K^{(0)} + \frac{1}{2} K^{(0)} \{ [AK]_L - \Lambda^{(0)} K \} , \quad (4.43a)$$

$$K^{(0)} = 2\bar{v} + \bar{v} \Lambda^{(0)} K^{(0)} , \quad (4.43b)$$

$$\Lambda = [gg]_{\Lambda} , \quad (4.43c)$$

$$[Hg]_D = M , \quad (4.43d)$$

$$M = [Kg]_F . \quad (4.43e)$$

Die eckigen Klammern repräsentieren die jeweiligen Exponential-Differentialoperatoren (durch einen Index voneinander unterschieden), die auf die von den Klammern eingeschlossenen Größen wirken; in den Fällen $X=L, D$ handelt es sich einfach um den Poissonklammeroperator der Wigner-Kirkwood-Entwicklung. In der ausführlichen Schreibweise der Gleichungen (4.21, 31, 32) stehen diese ebenfalls in eckigen Klammern. Des weiteren sollen die einzelnen Terme der Potenzreihenentwicklung des jeweiligen Exponential-Differentialoperators in der folgenden Weise mit einem oberen Index an der eckigen Klammer gekennzeichnet werden, wobei der Faktor $\hbar^k$ aus der Klammer herausgezogen wird:

$$[AB]_X =: \sum_{k=0}^{\infty} \hbar^k [AB]_X^{(k)} ; \quad X = L, A, D, F . \quad (4.44)$$

Im einzelnen gilt:

$$[AK]_L^{(k)} := \left[\frac{1}{k!} \left(\frac{-1}{2i} \right)^k (\nabla_R \nabla_P - \nabla_P \nabla_R) \right]^k \Lambda(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) \times \\ K(\vec{R}', \vec{P}'; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon) \Big|_{\vec{R}'=\vec{R}; \vec{P}'=\vec{P}} , \quad (4.45a)$$

$$[EG]_A^{(k)} := \left[\delta(\vec{p}-\vec{p}') \frac{1}{k!} \left(\frac{1}{4i} \right)^k ((\overleftarrow{\nabla}_p - \overrightarrow{\nabla}_{p'}) (\nabla_r - \nabla_{r'}) \right)^k \times \right. \\ \left. g(\vec{r}, \frac{\vec{P}}{2} + \vec{q}; \frac{\vec{P}}{2} + \epsilon') g(\vec{r}', \frac{\vec{P}}{2} - \vec{q}; \frac{\vec{P}}{2} - \epsilon') \right]_{\vec{q}=\vec{p}; \vec{r}=\vec{r}'; \vec{R}} , \quad (4.45b)$$

$$[KG]_F^{(k)} := \left[\frac{1}{k!} \left(\frac{1}{4i} \right)^k ((\nabla_{q'} - \nabla_{q''}) (\nabla_{\rho'} + 2\nabla_{\rho}) \right)^k \times \\ K(\vec{p}', \vec{p} + \vec{q}; \vec{q}', \vec{q}''; \epsilon + \epsilon') g(\vec{p}, \vec{q}; \epsilon') \Big|_{\vec{q}'=\vec{q}''=\frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \vec{p}=\vec{p}'; \vec{r}=\vec{r}'} , \quad (4.45c)$$

$$[HG]_D^{(k)} := \left[\frac{1}{k!} \left(\frac{-1}{2i} \right)^k (\nabla_r \nabla_P - \nabla_P \nabla_r) \right]^k \frac{1}{2} (H(\vec{r}, \vec{P}; \epsilon) g(\vec{r}', \vec{p}'; \epsilon) + \\ g(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) H(\vec{r}', \vec{p}'; \epsilon)) \Big|_{\vec{r}'=\vec{r}; \vec{p}'=\vec{p}} . \quad (4.45d)$$

Nun läßt sich das skizzierte Entwicklungsschema anwenden. Man setzt in das Gleichungssystem (4.43) die Entwicklungen (4.23,24,27 und 44) ein und betrachtet gesondert für jede Gleichung alle Terme, die als Koeffizienten dieselbe Potenz von $\hbar$ besitzen. Für die Dysongleichung wurde das Verfahren in Kapitel 4.2.3. bereits durchgeführt. Man erhält so für jede Ordnung (= Potenz von $\hbar$) ein Gleichungssystem, das aus vier Gleichungen besteht.

Die 0. Ordnung ist - wie bereits in Kapitel 4.2.2. erwähnt - identisch mit der LDA-Version. Sie lautet:

$$K^{(0)} = 2\bar{v} + \bar{v}\Lambda^{(0)}K^{(0)}, \quad (4.46a)$$

$$M^{(0)} = K^{(0)}g^{(0)}, \quad (4.46b)$$

$$\Lambda^{(0)} = g^{(0)}g^{(0)}, \quad (4.46c)$$

$$g^{(0)} = \frac{1}{H^{(0)}}; \quad H^{(0)} = \epsilon - \frac{p^2}{2m} - M^{(0)}. \quad (4.46d)$$

Für die 1. Ordnung erhält man:

$$K^{(1)} = \frac{1}{2}K^{(0)}(\Lambda^{(1)}K^{(0)} + [\Lambda^{(0)}K^{(0)}]_L^{(1)}), \quad (4.47a)$$

$$\Lambda^{(1)} = g^{(1)}g^{(0)} + g^{(0)}g^{(1)} + [g^{(0)}g^{(0)}]_\Lambda^{(1)}, \quad (4.47b)$$

$$M^{(1)} = K^{(1)}g^{(0)} + K^{(0)}g^{(1)} + [K^{(0)}g^{(0)}]_F^{(1)}, \quad (4.47c)$$

$$g^{(1)} = M^{(1)}(g^{(0)})^2, \quad (4.47d)$$

und für die 2. Ordnung:

$$K^{(2)} = \frac{1}{2} K^{(0)} (\Lambda^{(2)} K^{(0)} + \Lambda^{(1)} K^{(1)} + [\Lambda^{(1)} K^{(0)}]_L^{(1)} + [\Lambda^{(0)} K^{(1)}]_L^{(1)} + [\Lambda^{(0)} K^{(0)}]_L^{(2)}) , \quad (4.48a)$$

$$\Lambda^{(2)} = g^{(2)} g^{(0)} + g^{(0)} g^{(2)} + g^{(1)} g^{(1)} + [g^{(0)} g^{(1)}]_\Lambda^{(1)} + [g^{(1)} g^{(0)}]_\Lambda^{(1)} + [g^{(0)} g^{(0)}]_\Lambda^{(2)} , \quad (4.48b)$$

$$M^{(2)} = K^{(2)} g^{(0)} + K^{(1)} g^{(1)} + K^{(0)} g^{(2)} + [K^{(1)} g^{(0)}]_F^{(1)} + [K^{(0)} g^{(1)}]_F^{(1)} + [K^{(0)} g^{(0)}]_F^{(2)} , \quad (4.48c)$$

$$g^{(2)} = g^{(0)} (M^{(1)} g^{(0)})^2 + M^{(2)} g^{(0)} - [H^{(0)} g^{(0)}]_D^{(2)} . \quad (4.48d)$$

(In (4.46-48) sind alle für die Entwicklung nicht relevanten M unterdrückt.)

Einige dieser aus der formalen M -Entwicklung entstehenden Terme verschwinden aufgrund ihrer speziellen Struktur identisch, einige weitere ergeben nach der bereits in Kapitel 4.2.3. erwähnten bzw. nach einer für Brueckner-ähnliche Rechnungen üblichen Winkelmittelung Null. Es handelt sich hierbei um die Terme:

$$[K^{(i)} g^{(j)}]_F^{(1)} \quad \text{und} \quad [g^{(i)} g^{(j)}]_\Lambda^{(1)} , \quad (4.49)$$

die deshalb verschwinden, weil die $K^{(0)}$ -Matrix letztlich nur für Diagonalmatrixelemente bzgl. der Relativimpulse benötigt wird, und um die Terme:

$$[\Lambda^{(i)} K^{(j)}]_L^{(1)} . \quad (4.50)$$

Der Beweis hierfür ist in Anhang A.7. zu finden.

4.4.2. Die Entkopplung der Gleichungen

Trotz der Vereinfachung, die das Verschwinden der Differentialoperatorklammern 1. Ordnung bewirkt, bleiben die Gleichungen (4.47,48) praktisch unlösbar, da sie weiterhin gekoppelt sind. Es läßt sich jedoch eine Methode finden, die eine Entkopplung erlaubt, ohne daß der - an dieser Stelle wesentliche - Charakter der Gleichungen, d.h. die Rückwirkung der Massenoperatorkorrektur auf die Korrektur des Einteilchenpropagators, zerstört wird.

Sie besteht darin, die Terme $M^{(1)}$ und $M^{(2)}$ in den Gleichungen (4.47d) und (4.48d) durch die entsprechenden, in Hartree-Fock-Näherung bestimmten Ausdrücke zu ersetzen - die Vorgehensweise der HF-Theorie ist in den Kapiteln 2.2. und 4.3. bereits erläutert worden - und als Einteilchenpropagator die Zweipunktfunktion der ETF-Theorie, s. Kapitel 4.3., zu verwenden.

Substituiert man gemäß der HF-Annahme in (4.43) die K-Matrix durch die freie Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung:

$$K^{(0)} \longrightarrow 2 \bar{v}; \quad K^{(i)} = 0, i > 0, \quad (4.51)$$

so erhält man die Gleichungen der HF-Näherung:

$$M^{(0)-HF} = 2\bar{v}g^{(0)-HF}, \quad (4.52a)$$

$$g^{(0)-HF} = \frac{1}{H^{(0)-HF}}, \quad H^{(0)-HF} = \epsilon - \frac{p^2}{2m} - M^{(0)-HF}, \quad (4.52b)$$

$$M^{(1)-HF} = 2\bar{v}g^{(1)-HF}, \quad (4.53a)$$

$$g^{(1)-HF} = M^{(1)-HF} (g^{(0)-HF})^2; \quad (4.53b)$$

$$M^{(2)-HF} = 2\bar{v}g^{(2)-HF} + [2\bar{v}g^{(0)-HF}]_F^{(2)} , \quad (4.54a)$$

$$g^{(2)-HF} = g^{(0)-HF} ((M^{(1)-HF} g^{(0)-HF})^2 + M^{(2)-HF} g^{(0)-HF} - [H^{(0)-HF} g^{(0)-HF}]_D^{(2)}) . \quad (4.54b)$$

Eine eingehendere Untersuchung der 1. Ordnung, d.h. Einsetzen von (4.53b) in (4.53a) und Beachtung der speziellen Gestalt (3.22) von $g^{(0)-HF}$ und der Energieunabhängigkeit von $M^{(1)-HF}$, zeigt, daß diese identisch verschwindet; der Beweis ist in Anhang A.8. zu finden.

Benützt man darüberhinaus für die 2. Ordnung der Einteilchengreenfunktion die ETF-Form (4.38), so gelangt man schließlich zum gewünschten Resultat:

$$M^{(1)-HF} = 0 , \quad (4.55a)$$

$$\bar{M}^{(2)-HF} = 2\bar{v}g^{(2)-ETF} + [2\bar{v}g^{(0)-ETF}]_F^{(2)} , \quad (4.55b)$$

$$g^{(2)-ETF} = -g^{(0)-ETF} [H^{(0)-HF} g^{(0)-ETF}]_D^{(2)} . \quad (4.55c)$$

Das Verschwinden von $M^{(1)-HF}$ hat weitergehend sogar das Verschwinden der gesamten 1. Ordnung in Leiternäherung zur Folge; denn - vgl. (4.47) - mit $M^{(1)-HF} = 0$ in (4.47d) wird $g^{(1)}$ zu Null, somit auch $\Lambda^{(1)}$ und $K^{(1)}$ und letztlich $M^{(1)}$ in (4.47c).

Zur Bestimmung der ersten Korrekturen zur Leiternäherung muß damit das folgende Gleichungssystem gelöst werden:

$$K^{(2)} = \frac{1}{2}K^{(0)}(\Lambda^{(2)}K^{(0)} + [\Lambda^{(0)}K^{(0)}]_L^{(2)}) , \quad (4.56a)$$

$$\Lambda^{(2)} = g^{(2)}g^{(0)} + g^{(0)}g^{(2)} + [g^{(0)}g^{(0)}]_\Lambda^{(2)} , \quad (4.56b)$$

$$M^{(2)} = K^{(0)}g^{(2)} + K^{(2)}g^{(0)} + [K^{(0)}g^{(0)}]_F^{(2)} , \quad (4.56c)$$

$$g^{(2)} = g^{(0)} (\hat{M}^{(2)-HF} g^{(0)} - [H^{(0)} g^{(0)}]_D^{(2)}) . \quad (4.56d)$$

$\hat{M}^{(2)-HF}$ ist durch (4.55c) und (4.59) gegeben (vgl. die folgende Argumentation).

Bei der praktischen Behandlung dieser Näherung stößt man auf das Problem, daß eine freie Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung aufgrund der starken Abstossung bei kleinen Abständen in Hartree-Fock-Approximation nur sehr schlechte oder - im Falle eines hard- bzw. soft-core-Potentials - gar keine Resultate liefert. $\bar{v}$ ist daher noch durch eine effektive Kraft zu ersetzen, die zwar die charakteristischen Eigenschaften der freien Wechselwirkung beibehält, jedoch die besagte Singularität vermeidet.

Zu diesem Zweck wird die Leitergleichung für die freie, d.h. nicht im Medium Kernmaterie bestimmte, $K^{(0)}$ -Matrix gelöst. Diese mit $K_{\text{frei}}^{(0)}(\vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon)$ bezeichnete Wechselwirkung besitzt im Vergleich zur freien Wechselwirkung $\bar{v}$ noch die Abhängigkeiten vom Schwerpunktsimpuls $\vec{P}$ und der Energie ϵ . In (4.55b) wird $K_{\text{frei}}^{(0)}$ für die folgenden Argumente benötigt:

$$K_{\text{frei}}^{(0)} = K_{\text{frei}}^{(0)}(\vec{P}=\vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon=E(\vec{R}, \vec{p})+E(\vec{R}, \vec{q})) . \quad (4.57)$$

Die Eliminierung der direkten $\vec{P}$ - und ϵ -Abhängigkeit geschieht durch die Mittelung über die Fermikugel, ähnlich der Methode der "folded microscopic interactions", s. Kapitel 4.3. und Anhang A.4.:

$$\begin{aligned} \bar{K}_{\text{frei}}^{(0)}(\vec{p}, \vec{q}; p_F) &= \left\{ \int d^3 q' \, \theta(\epsilon_F - E(\vec{R}, \vec{q}')) \right\} \times \\ &\quad K_{\text{frei}}^{(0)}(\vec{p}+\vec{q}'; \vec{k}, \vec{k}'; E(\vec{R}, \vec{p})+E(\vec{R}, \vec{q}')) \Big|_{\vec{k}=\vec{k}', \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}} \times \\ &\quad \left\{ \int d^3 q' \, \theta(\epsilon_F - E(\vec{R}, \vec{q}')) \right\}^{-1} . \end{aligned} \quad (4.58)$$

Indirekt ist so in $\bar{K}_{\text{frei}}^{(0)}$ der Einfluß des Mediums noch spürbar; ebenso ist

über den Fermiimpuls $p_F(R)$ eine Ortsabhängigkeit gegeben. (4.55b) ist damit in der folgenden Weise zu modifizieren:

$$\bar{M}^{(2)-HF} \longrightarrow \hat{M}^{(2)-HF} = \bar{K}_{\text{frei}}^{(0)} g^{(2)-ETF} + [\bar{K}_{\text{frei}}^{(0)} g^{(0)-ETF}]_F^{(2)}. \quad (4.59)$$

4.4.3. Weitere Näherungen

Vor der detaillierten Diskussion der einzelnen Korrekturterme im nächsten Abschnitt sollen noch einige Näherungen behandelt werden, die bei der Berechnung aller Korrekturen gleichermaßen angewandt werden. Diese Näherungen sind zwar kein wesentlicher Bestandteil der Theorie - die an sich bereits auswertbare Form ist mit (4.56) gegeben -, sie erleichtern die praktische Rechnung jedoch erheblich.

Für die erste dieser Näherungen ist die relativ schwache Energieabhängigkeit der $K^{(0)}$ -Matrix zu beachten. Sie erlaubt es, zweite und höhere Energieableitungen von $K^{(0)}$ zu vernachlässigen:

$$\frac{\partial^i}{\partial \epsilon^i} K^{(0)}(\epsilon) \approx 0 \quad \text{für } i > 1; \quad (4.60)$$

vgl. hierzu ebenfalls Kapitel 5.1. und Abbildung 1. Auch der sich mit verschwindender Dichte ausbildende Deuteron-Bindungspol im 3S_1 - 3D_1 -Kanal hat an dieser Stelle wenig Einfluß, da er (falls vorhanden) im Sinne eines Hauptwertintegrals zu regularisieren ist.

Von dieser Approximation sind ebenfalls einige Orts- und Impulsableitungen von $K^{(0)}$ und $\Lambda^{(0)}$ betroffen, da sie eine ähnliche Struktur wie die Energieableitungen aufweisen (s. Kapitel 5.3.).

Eine weitere Näherung besteht darin, Orts- und Impulsableitungen des Pauliprojektors N , Gl.(3.39,40), im Zweiteilchenpropagator unberücksichtigt zu lassen. Dies bedeutet (u.a.), daß für die zwei streuenden Teilchen dieselbe Fermikugel angenommen wird, obwohl sie sich i.A. nicht am selben Ort befinden. Diese Annahme erscheint gerechtfertigt angesichts des Umstands, daß es sich beim üblicherweise benutzten Pauliprojektor N bereits um einen approximativen Ausdruck handelt (vgl. die Bemerkung zur

Winkelmittelung in Kapitel 3.3.). Eine weitere Unterstützung erfährt diese Vorgehensweise durch einen Vorgriff auf die numerischen Ergebnisse; es stellt sich heraus, daß die Beiträge aus den Korrekturen zur effektiven Wechselwirkung insgesamt klein sind.

Die letzte Näherung betrifft die Wignerfunktion $n(\vec{r}, \vec{p})$. Bei den Orts- und Impulsableitungen dieser Funktion wird nur der Sprung an der Fermikante berücksichtigt, während der restliche Verlauf dieselbe Vorgehensweise wie beim Pauliprojektor nahelegt, vgl. auch Abschnitt 7..

5. Das mikroskopische optische Potential;

LDA-Näherung und semiklassische Korrekturen

In diesem Abschnitt werden die einzelnen LDA-Korrekturbeiträge zum mikroskopischen optischen Potential im Detail untersucht. Das Entwicklungsschema liefert für sie eine natürliche Einteilung nach ihrer physikalischen Herkunft. Gemäß (4.46b) und (4.56c) läßt sich der Massenoperator als Summe von vier Termen schreiben:

$$M = M^{(0)} + M^I + M^{II} + M^{III}, \quad (5.1)$$

in der

$$M^{(0)} = K^{(0)} * g^{(0)} \quad (5.2)$$

der LDA-Beitrag ist; "*" steht symbolisch für die Faltungsgleichung. Da die Terme höherer Ordnung in Abhängigkeit von den LDA-Größen formuliert sind, sollen in Kapitel 5.1. zunächst die nötigen Resultate der LDA-Rechnung bereitgestellt werden.

Für den ersten Term höherer Ordnung gilt:

$$M^I = M^2(K^{(0)} * g^{(2)}), \quad (5.3)$$

Praktisch liefert M^I die Beiträge, die aus der Verwendung einer verbesserten Phasenraumverteilungsfunktion entstehen. Sie werden in Kapitel 5.2. untersucht.

In Kapitel 5.3. werden Effekte diskutiert, die aus dem zusätzlichen Term $K^{(2)}$ in der effektiven Zweiteilchenwechselwirkung entspringen:

$$M^{II} = M^2(K^{(2)} * g^{(0)}), \quad (5.4)$$

Der letzte Beitrag entsteht durch die Wirkung des Differentialoperators der semiklassischen Entwicklung in der Faltungsgleichung selbst:

$$M^{III} = M^2[K^{(0)} * g^{(0)}]_F^{(2)}. \quad (5.5)$$

Dieser Term, der in Kapitel 5.4. untersucht wird, findet in der Literatur teilweise Berücksichtigung; die Näherung, die sich daraus ergibt, wird als "verbesserte" LDA bezeichnet [JLM77b, Ma81].

5.1. Die LDA-Näherung

Da das selbstkonsistent zu bestimmende effektive Einteilchenpotential einen wesentlichen Einfluß in den Gleichungen für die Korrekturterme besitzt, muß es in einer möglichst korrekten Form schon in der LDA-Version der benutzten Approximation auftreten. Aus diesem Grund kommen von den in Kapitel 3.3. beschriebenen Näherungsverfahren nur die $\Lambda^{(11)}$ -Theorie oder die BHF-Theorie mit "continuous choice" in Frage. Da die $\Lambda^{(11)}$ -Version schon für Kernmaterie (auch mit einer einfachen Wechselwirkung) erhebliche Schwierigkeiten bei der praktischen Lösung macht (wesentlicher Grund ist die volle Berücksichtigung von Loch-Loch-Propagation), wurde für die vorliegende Arbeit die BHF-Version gewählt. Ein weiterer Grund für diese Wahl besteht darin, daß mit den ausführlichen LDA-Arbeiten von Mahaux et al. [JLM74, JLM75, JLM76, JLM77a,b, Ma79] ein umfangreiches Vergleichsmaterial für die BHF-Version zur Verfügung steht. Der Preis für diese einschränkende Wahl ist die Vernachlässigung der Beiträge des Korrelationsgraphen (oder allgemeiner: von Mehr-Loch-Linien-Beiträgen) zum Realteil des optischen Potentials, vgl. Kapitel 3.3. und Anhang A.2..

Es wird somit das folgende Gleichungssystem als Grundlage der weiteren Untersuchung benützt (der Index "Br" ist ab nun unterdrückt; $\vec{q}_\pm = \frac{\vec{p}}{2} \pm \vec{p}$):

$$K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = 2 \bar{v}(\vec{p}, \vec{p}') + \iint d^3q d^3q' v(\vec{p}, \vec{q}) \times$$

$$\Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon), \quad (5.6.a)$$

$$\Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \frac{\theta(E(\vec{R}, \vec{q}_+) - \epsilon_F(R)) \theta(E(\vec{R}, \vec{q}_-) - \epsilon_F(R))}{\epsilon - E(\vec{R}, \vec{q}_+) - E(\vec{R}, \vec{q}_-) + i\eta}, \quad (5.6.b)$$

$$M^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = \int d^3q K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p} + \vec{q}; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}; E(\vec{r}, \vec{q}) + \epsilon) \times$$

$$n(\vec{r}, \vec{q}) \theta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})) , \quad (5.6.c)$$

$$n^{-1}(\vec{r}, \vec{p}) = 1 - \frac{\partial}{\partial \epsilon} \text{Re } M^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) \Big|_{\epsilon=E(\vec{r}, \vec{p})} \quad (p < p_F) , \quad (5.6.d)$$

$$E(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + \text{Re } M^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; E(\vec{r}, \vec{p})) ; \quad (5.6.e)$$

für $K^{(0)}$ wird ab nun immer der obere Randwert

$$K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) \equiv \tilde{K}^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon + i\eta) \quad (5.7)$$

verwendet, vgl. Anhang A.2., Gl. (A.2.10).

Abweichend von der Standard-BHF-Version wird in der Faltungsgleichung (5.6.c) die korrekte Wignerfunktion $n(\vec{r}, \vec{p})$ belassen, da sie in einigen Korrekturbeiträgen größeren Einfluß gewinnt, s. Kapitel 5.2.. Die Berücksichtigung der Abweichung der Impulsverteilungsfunktion von der reinen Einteilchenmodell-Form ist in der Literatur als "renormiertes BHF"-Verfahren bekannt [Ma79b].

Aus lösungstechnischen Gründen wird der Zweiteilchenpropagator nicht direkt in der Form (5.6.b) verwendet, sondern zunächst einer Impulsmitte-
lungsprozedur unterzogen. Die Details dieser Winkelmittelung sind in Abschnitt 6. beschrieben, wo für die Leitergleichung eine Partialwellenentwicklung vorgenommen wird. Ein wichtiges Resultat dieser Prozedur besteht darin, daß dann sowohl $\Lambda^{(0)}$ als auch $K^{(0)}$ nur noch vom Betrag des Schwerpunktsimpulses abhängen.

Eine ähnliche Aussage läßt sich auch über die Schwerpunkts-Ortskoordinate von $\Lambda^{(0)}$ und $K^{(0)}$ treffen. Sie ist bei den LDA-Größen über die Dichteab-

hängigkeit gegeben; da für die Dichte ρ ein rotationsinvarianter Ansatz gemacht wird (Abschnitt 7.), ρ also nur von $|\vec{R}|$ abhängt, gilt dasselbe auch für $\Lambda^{(0)}$ und $K^{(0)}$.

(Wegen der einheitlichen Schreibweise wird die allgemeine Vektorschreibweise für Schwerpunktsimpuls und -ort beibehalten.)

Das Gleichungssystem (5.6.a-e) (und auch die Korrekturen aus den Kapiteln 5.2.-4.) liefern ein energieabhängiges und nichtlokales - oder, was gleichbedeutend ist, impulsabhängiges - verallgemeinertes optisches Potential (Massenoperator). In Anhang A.1. wird gezeigt, daß das optische Modell-Potential mit dem "on-energy-shell"-Wert des Massenoperators zu identifizieren ist:

$$U_{\text{opt}}^{nl}(\vec{r}, \vec{p}) = V_{\text{opt}}^{nl}(\vec{r}, \vec{p}) + iW_{\text{opt}}^{nl}(\vec{r}, \vec{p}) = M(\vec{r}, \vec{p}; E(\vec{r}, \vec{p})), \quad (5.8)$$

wodurch ein nichtlokales (Index "nl") und energieunabhängiges Potential entsteht; V bzw. W bezeichnet den Real- bzw. Imaginärteil.

Üblicherweise wird in der Literatur das optische Potential jedoch in einer lokalen (Index "l") und energieabhängigen Form dargestellt. Mit Hilfe der von Perey und Saxon [PS64] und Frahn [Fr65] eingeführten "lokalen Energie-Näherung" läßt sich das nichtlokale Potential (5.8) in der gewünschten Weise umformen.

Unter der Annahme, daß das Potential nur vom Impulsbetrag abhängt, entwickelt man um einen festen Wert p_0 :

$$V_{\text{opt}}^{nl}(\vec{r}, \vec{p}) \approx V_{\text{opt}}^{nl}(\vec{r}, p^2) \approx V_{\text{opt}}^{nl}(\vec{r}, p_0^2) + (p^2 - p_0^2) \frac{\partial}{\partial (p^2)} V_{\text{opt}}^{nl}(\vec{r}, p^2) \Big|_{p^2 = p_0^2}, \quad (5.9)$$

(ebenso für W_{opt}^{nl}).

Durch Einsetzen in die Schrödingergleichung überzeugt man sich davon, daß

die beste Wahl für p_0 im "lokalen Energie"-Wert

$$\frac{p_0^2}{2m} = E - v_{\text{opt}}^{\text{nl}}(\vec{r}, p_0^2) \quad (5.10)$$

besteht; das zu (5.8) korrespondierende lokale und energieabhängige optische Potential ist mithin durch

$$U_{\text{opt}}^1(\vec{r}, E) = v_{\text{opt}}^1(\vec{r}, E) + i w_{\text{opt}}^1(\vec{r}, E) = M(\vec{r}, p_0; E), \quad (5.11)$$

$$E = \frac{p_0^2}{2m} + \text{Re } M(\vec{r}, p_0; E) \quad (5.12)$$

gegeben.

Bei der Darstellung und Diskussion der Ergebnisse dieser Arbeit im 8. Abschnitt wird immer auf diese zweite Version des optischen Potentials zurückgegriffen.

Die weitere Vorgehensweise bei einer LDA-Rechnung wurde bereits in Kapitel 3.4. angedeutet. Mittels des fest vorgegebenen (und ortsabhängigen) Fermiimpulses $p_F(r)$ wird das Gleichungssystem (5.6,a-e) für jeden Ort r selbstkonsistent gelöst. Die Fixierung von p_F geschieht in der Regel über die Vorgabe einer Dichte $\rho(r)$ und die Beziehung (s. Gl. (3.41)):

$$p_F(r) = \left(\frac{3\pi^2}{2} \rho(r) \right)^{1/3}. \quad (5.13)$$

Da die selbstkonsistente LDA-Rechnung ihrerseits eine Phasenraumverteilungsfunktion $n(\vec{r}, \vec{p})$ liefert, ergibt sich eine Konsistenzbedingung. Es muß gelten:

$$\frac{4}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3q \, \theta(p_F(r)-q) \, n(\vec{r}, \vec{q}) = \rho(r). \quad (5.14)$$

Angesichts der Unempfindlichkeit des Integrals (5.14) in bezug auf kleinere Änderungen bei $n(\vec{r}, \vec{p})$ ist es ausreichend, sich hier auf die LDA-Näherung, also

$$n^{-1}(\vec{r}, \vec{p}) = 1 - \frac{\partial}{\partial \epsilon} \operatorname{Re} M^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) \Big|_{\epsilon=E(\vec{r}, \vec{p})}, \quad (p < p_F) \quad (5.15)$$

zu beschränken.

Eine weitere Integration über die Ortsvariable liefert die Teilchenzahl A des untersuchten Kerns:

$$A = \frac{4}{(2\pi\hbar)^3} \iint d^3q d^3r \, \theta(p_F(r) - q) n(\vec{r}, \vec{q}) \quad (5.16)$$

Mit der Fixierung des lokalen Fermiimpulses $p_F(r)$ und der Beziehung (5.6.e) für die Einteilchenenergie erhält man den Ausdruck für die lokale Fermienergie $\epsilon_F(r)$:

$$\epsilon_F(r) = E(\vec{r}, p_F(r)) = \frac{p_F^2(r)}{2m} + \operatorname{Re} M^{(0)}(\vec{r}, p_F(r); \epsilon_F(r)) \quad (5.17)$$

ϵ_F ist somit ortsabhängig.

Eine alternative, ebenfalls in diesem Zusammenhang benutzte Fixierung ist die "Lokale-Impuls-Approximation" (s. [HS85a], wo eine detaillierte Diskussion zu finden ist), die eine feste, globale Fermienergie und (in der Regel) ein lokales Einteilchenpotential $V(r)$ vorgibt [RS80]; den Fermiimpuls erhält man aus:

$$p_F(r) = (2m(\epsilon_F - V(r)))^{1/2} \quad (5.18)$$

Gegenüber dieser Festlegung erscheinen die Gleichungen (5.13) und (5.17) die natürlichere Wahl darzustellen, da sie mit der Betonung des lokalen Charakters von ϵ_F am Grundgedanken der gesamten Theorie, nämlich für jeden Ort des Kerns Kernmaterieverhältnisse anzunehmen, festhalten. Dieser Standpunkt wird auch in den Arbeiten von Mahaux et al. [JLM77b] eingenommen, wo die (lokale) Fermienergie als Potenzreihe in der Dichte angesetzt wird.

Ein letzter zu erwähnender Punkt betrifft die LDA-Version der K-Matrix.

Es ist ein qualitativer Unterschied festzustellen zwischen der "freien"

$K^{(0)}$ -Matrix (= Streuamplitude des Zweinukleonenproblems) und der in Kernmaterie errechneten $K^{(0)}$ -Matrix. Als Beispiel ist in Abbildung 1 der

Realteil der 3S_1 -Partialwelle für verschiedene Werte der Ortsvariablen r , d.h. für verschiedene Dichtewerte $\rho(r)$ und damit für verschiedene Fermiimpulswerte $p_F(r)$, aufgetragen. " $r=1\text{fm}$ " entspricht Kernmaterieverhältnissen.

Die "freie" $K^{(0)}$ -Matrix ist noch einmal gesondert notiert; sie besitzt bei $E = -2.2 \text{ MeV}$ den bekannten Deuteron-Bindungspol. Diese Polstruktur verschwindet in Kernmaterie unter dem Einfluß des Pauliprinzips völlig. Im Übergangsgebiet mit abnehmender Dichte nimmt auch der bestimmende Charakter des Pauliprinzips ab, und die Polstruktur bildet sich aus. Dieses Phänomen macht eine sorgfältige Behandlung des Faltungsintegrals für kleine Dichten (etwa ab 15% der Mittelpunktsdichte) notwendig.

Ist der Pol schon ausgebildet, so schreibt die Faltungsgleichung (3.9)

für den Pol ein Hauptwertintegral vor. Dies legt ein Regularisierungsverfahren nahe, bei dem auch schon der sich ausbildende Pol in diesem Sinn behandelt wird. Der Umstand, daß für die Berechnung des optischen Potentials, d.h. für Massenoperatorenergien größer Null, dieser kritische Energiebereich der K-Matrix nur eine untergeordnete Rolle spielt, eine exakte Behandlung also auch nicht vonnöten ist, läßt diese heuristische Vorgehensweise als gerechtfertigt erscheinen.

5.2. Korrekturen durch den Einteilchenpropagator

Entsprechend den Gleichungen (4.56c) und (5.3) ist die Korrektur M^I , die sich aus dem verbesserten Einteilchenpropagator ergibt, durch den Ausdruck

$$M^I(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi i} e^{i\eta\epsilon'} \int d^3q K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+\epsilon') \times \\ \mathcal{H}_g^{(2)}(\vec{r}, \vec{q}; \epsilon') \quad (5.19)$$

gegeben. $g^{(2)}$ wurde bereits in Kapitel 4.2.3. bzw. Anhang A.5. explizit berechnet:

$$g^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = -g^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) [-\hat{M}^{(2)-HF}(\vec{r}, \vec{p}) g^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) + \\ B_2(\vec{r}, \vec{p}) (g^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon))^2 + B_3(\vec{r}, \vec{p}) (g^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon))^3]. \quad (5.20)$$

B_2 und B_3 sind die Potentialkoeffizienten aus Anhang A.5.. Gemäß Kapitel 4.4.2. wird die Näherung

$$\hat{M}^{(2)-HF}(\vec{r}, \vec{p}) = \int d^3q \bar{K}_{frei}^{(0)}(\frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; p_F(r)) \int \frac{d\epsilon'}{2\pi i} e^{i\eta\epsilon'} \times \\ \mathcal{H}_g^{(2)-ETF}(\vec{r}, \vec{q}; \epsilon') - \frac{1}{8} \int d^3q [(\nabla_q - \nabla_{q''}) \nabla_p]^2 \{\bar{K}_{frei}^{(0)}(\vec{q}', \vec{q}''; p_F(r)) \times \\ \int \frac{d\epsilon'}{2\pi i} e^{i\eta\epsilon'} \mathcal{H}_g^{(0)-ETF}(\vec{p}, \vec{q}; \epsilon')\}_{\vec{q}'=\vec{q}''=\frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \vec{p}=\vec{r}} \quad (5.21)$$

benützt.

Für eine physikalische Interpretation dieser Korrektur ist es vorteilhaft, vorläufig die Energieabhängigkeit der K-Matrix zu vernachlässigen.

Die Energieintegration erstreckt sich dann nur über die Einteilchen-greenfunktion und läßt sich ausführen. Man erhält die verbesserte, d.h. bis zur 2. Ordnung entwickelte Phasenraumverteilungsfunktion. Die Korrektur berücksichtigt somit - wie zu erwarten - Beiträge der Dichtematrix, die über die in der LDA verwendete Thomas-Fermi-Version hinausgehen. Sie werden in Abhängigkeit von Orts- und Impulsableitungen des in LDA-Näherung errechneten effektiven Einteilchenpotentials ausgedrückt; ebenso geht der "Rückkopplungs"term $\hat{M}^{(2)-HF}$ ein, der einen nicht unerheblichen Beitrag zu dieser Korrektur leistet (s. Abschnitt 8.).

Ferner muß in der exakten Rechnung die Energieabhängigkeit der K-Matrix berücksichtigt werden; dies kommt durch zusätzlich auftretende Energieableitungen zum Ausdruck.

Alle bei der Energieintegration in (5.19) auftretenden Terme haben die Struktur des folgenden, allgemein mit m_1 bezeichneten Ausdrucks (die Potentialkoeffizienten B_2 , B_3 und $\hat{M}^{(2)-HF}$ sind für die Energieintegration ohne Bedeutung):

$$m_1(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = \int \frac{d\epsilon'}{2\pi i} e^{i\eta\epsilon'} \int d^3q \hat{K}^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+\epsilon'+i\eta) \times$$

$$(g^{(0)}(\vec{r}, \vec{q}; \epsilon'))^1. \quad (5.22)$$

Es tritt das Problem auf, wie höhere Potenzen von $g^{(0)}$ zu behandeln sind. Man findet, daß in guter Näherung

$$(g^{(0)})^1 = \theta(\epsilon - \epsilon_F) \frac{\theta(E - \epsilon_F)n_{>}^1 + \theta(\epsilon_F - E)n_{<}^1}{(\epsilon - E + i\eta)^1} +$$

$$\theta(\epsilon_F - \epsilon) \frac{\theta(E - \epsilon_F)n_{>}^1 + \theta(\epsilon_F - E)n_{<}^1}{(\epsilon - E - i\eta)^1} \quad (5.23)$$

verwendet werden kann (s. Anhang A.9.). Die Orts- und Impulsvariablen sind der Übersichtlichkeit wegen nicht notiert. Die wichtigsten Regeln für das Rechnen mit Distributionen der Art $(x \pm i\eta)^{-n}$ sind in Anhang A.10. zusammengestellt.

Aus Gleichung (5.23) ist nun auch der Grund für die Berücksichtigung der Wignerfunktion in der Faltungsgleichung (5.6.c) ersichtlich; sie tritt mit bis zu 4. Potenz auf und bewirkt eine beträchtliche Reduktion der entsprechenden Terme, da $n(\vec{r}, \vec{p})$ im wichtigen Bereich nahe der Fermikante am stärksten von der Fermigasverteilung abweicht.

Die Umformung von (5.22) gemäß den Formeln aus Anhang A.10. liefert:

$$\begin{aligned}
 m_1(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) &= \int \frac{d\epsilon'}{2\pi i} e^{i\eta\epsilon'} \int d^3q \tilde{K}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+\epsilon'+i\eta) \times \\
 &\quad \left[\frac{\theta(E(\vec{r}, \vec{q}) - \epsilon_F(r)) n_{>}^1(\vec{r}, \vec{q}) + \theta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})) n_{<}^1(\vec{r}, \vec{q})}{(\epsilon' - E(\vec{r}, \vec{q}) + i\eta)^1} + \right. \\
 &\quad 2\pi i \frac{(-1)^{1-1}}{(1-1)!} \theta(\epsilon_F(r) - \epsilon') (\theta(E(\vec{r}, \vec{q}) - \epsilon_F(r)) n_{>}^1(\vec{r}, \vec{q}) + \\
 &\quad \left. \theta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})) n_{<}^1(\vec{r}, \vec{q})) \delta^{(1-1)}(\epsilon' - E(\vec{r}, \vec{q})) \right] \quad (5.24)
 \end{aligned}$$

Da $\tilde{K}(\epsilon+i\eta)$ und $(\epsilon+i\eta)^{-1}$ keine Pole in der oberen Halbebene (des komplexen Energiearguments) besitzen, verschwindet das Kurvenintegral über das Produkt dieser beiden Funktionen, und von der eckigen Klammer in (5.24) verbleibt nur der zweite Term, für den die Energieintegration leicht auszuführen ist:

$$\begin{aligned}
 m_1(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) &= \int d^3q \frac{1}{(1-1)!} [\theta(E(\vec{r}, \vec{q}) - \epsilon_F(r)) n_{>}^1(\vec{r}, \vec{q}) + \theta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})) \times \\
 &\quad n_{<}^1(\vec{r}, \vec{q})] \times \sum_{k=0}^{1-1} \binom{1-1}{k} \frac{(1-1-k)}{k} (0) (\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+E(\vec{r}, \vec{q})) \times
 \end{aligned}$$

$$(-1)^k \theta^{(k)}(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})) \quad ; \quad (5.25)$$

$$K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; E) := \frac{\partial^k}{\partial \epsilon^k} K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) \big|_{\epsilon=E} \quad , \quad (5.26)$$

$$\theta^{(k)}(\epsilon_F - E) := \frac{\partial^k}{\partial \epsilon^k} \theta(\epsilon) \big|_{\epsilon=\epsilon_F - E} \quad . \quad (5.27)$$

Bei der Durchführung der letzten verbleibenden Impulsintegration stößt man auf die Schwierigkeit, daß die formale Rechnung für die Distributionsprodukte $\theta \theta^{(k)}$ auf sinnlose Ausdrücke wie etwa $\delta(\epsilon_F - \epsilon_F) = \delta(0)$ führt.

Eine genauere Untersuchung dieser Terme ist daher nötig, um ihnen durch einen geeigneten Grenzwertprozeß Sinn zu verleihen.

Beachtet man, daß die θ -Funktion $\theta(\epsilon_F - E)$ daher rührt, daß in (A.9.19) die Einteilchengreenfunktion g durch den entsprechenden retardierten Propagator g_r , vgl. (3.16), plus den Term

$$2\pi i \theta(\epsilon_F(r) - \epsilon) A(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) \quad (5.28)$$

für den Bereich $\epsilon < \epsilon_F$ ausgedrückt wird, so läßt sich das Argument der θ -Funktion um einen infinitesimalen Betrag δ nach links verschieben, ohne den Ausdruck (A.9.19) für g zu verändern:

$$\theta(\epsilon_F(r) - \epsilon) \longrightarrow \theta(\epsilon_F(r) - \epsilon - \delta) \quad . \quad (5.29)$$

Die Vertauschung der Impulsintegration in (5.25) mit dem Grenzwertprozeß " $\delta \longrightarrow 0^+$ " liefert dann:

$$m_1(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = \lim_{\delta \longrightarrow 0^+} \int d^3q \frac{1}{(1-1)^l} \left[\theta(E(\vec{r}, \vec{q}) - \epsilon_F(r)) n_{>}^1(\vec{r}, \vec{q}) + \right. \\ \left. \theta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})) n_{<}^1(\vec{r}, \vec{q}) \right] \times \sum_{k=0}^{l-1} (-1)^k \binom{l-1}{k} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \binom{1-1-k}{K}^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+E(\vec{r}, \vec{q})) \theta^{(k)}(\epsilon_F(r)-E(\vec{r}, \vec{q})-\delta) \\
 = & \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int d^3 q \frac{1}{(1-1)!} n_{\zeta}^1(\vec{r}, \vec{q}) \times \sum_{k=0}^{1-1} (-1)^k \binom{1-1}{k} \theta^{(k)}(\epsilon_F(r)-E(\vec{r}, \vec{q})-\delta) \times \\
 & \binom{1-1-k}{K}^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; +E(\vec{r}, \vec{q})) . \quad (5.30)
 \end{aligned}$$

Der vollständige Ausdruck für die Korrekturen des Massenoperators durch die Einteilchengreenfunktion lautet dann nach Berücksichtigung der Näherungen aus Kapitel 4.4.3. ($\dot{K} := \frac{\partial}{\partial \epsilon} K$):

$$\begin{aligned}
 M^I(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = & -\hbar^2 \left[\int d^3 q \frac{1}{2!} n_{\zeta}^3(\vec{r}, \vec{q}) B_2(\vec{r}, \vec{q}) [-2\dot{K}^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+E(\vec{r}, \vec{q})) \times \right. \\
 & \delta(\epsilon_F(r)-E(\vec{r}, \vec{q})) + K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+E(\vec{r}, \vec{q})) \delta'(\epsilon_F(r)-E(\vec{r}, \vec{q}))] + \\
 & \int d^3 q \frac{1}{3!} n_{\zeta}^4(\vec{r}, \vec{q}) B_3(\vec{r}, \vec{q}) [3\dot{K}^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+E(\vec{r}, \vec{q})) \times \\
 & \delta'(\epsilon_F(r)-E(\vec{r}, \vec{q})) - K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+E(\vec{r}, \vec{q})) \times \\
 & \delta''(\epsilon_F(r)-E(\vec{r}, \vec{q}))] - \int d^3 q n_{\zeta}^2(\vec{r}, \vec{q}) \dot{M}^{(2)-HF}(\vec{r}, \vec{q}) \times \\
 & [\dot{K}^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+E(\vec{r}, \vec{q})) \theta(\epsilon_F(r)-E(\vec{r}, \vec{q})) - \\
 & K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}+\vec{q}; \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}; \epsilon+E(\vec{r}, \vec{q})) \delta(\epsilon_F(r)-E(\vec{r}, \vec{q}))] \Big] . \quad (5.31)
 \end{aligned}$$

Für die Besetzungszahlfunktion $n_{\zeta}(\vec{r}, \vec{p})$ ist der linksseitige Grenzwert $|\vec{p}|-\delta$, $\delta \rightarrow 0^+$, zu verwenden; die Behandlung der Ableitungen der δ -Funktion ist in Anhang A.10. beschrieben.

5.3. Korrekturen durch die effektive Zweiteilchenwechselwirkung

Die zweite Klasse von Korrekturen entsteht durch den Umstand, daß die Lösung der Leitergleichung für die effektive Zweiteilchenwechselwirkung nicht mehr in homogener Kernmaterie erfolgt. Es treten ortsabhängige Effekte auf, die über die üblicherweise betrachtete einfache Dichteabhängigkeit der K-Matrix hinausgehen.

Nach (5.4) und (4.56a) ist dieser Korrekturbeitrag M^{II} durch zwei Terme gegeben:

$$M^{II} = M^2(K_a^{(2)} + K_b^{(2)}) * g^{(0)}, \quad (5.32)$$

$$\text{mit } (q_{\pm}^{\rightarrow} = \frac{\vec{p}}{2} \pm \frac{\vec{p} + \vec{p}'}{2});$$

$$\begin{aligned} K_a^{(2)} &= \frac{1}{2} K^{(0)} \Lambda^{(2)} K^{(0)} = \\ &= K_a^{(2)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = \frac{1}{2} \int d^3 q d^3 q' K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) \times \\ &\quad \Lambda^{(2)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon), \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} \Lambda^{(2)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) &= \frac{1}{\hbar} \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} \hbar^2 \left[-\frac{1}{32} [\delta(\vec{p} - \vec{p}') ((\vec{v}_p - \vec{v}_{p'}) (\vec{v}_R - \vec{v}_{R'}))^2 \times \right. \\ &\quad g^{(0)}(\vec{r}, \vec{q}_+; \frac{\epsilon}{2} + \epsilon') g^{(0)}(\vec{r}', \vec{q}_-; \frac{\epsilon}{2} - \epsilon')]_{\vec{r}=\vec{r}', \vec{r}=\vec{R}} + \delta(\vec{p} - \vec{p}') \times \\ &\quad [g^{(2)}(\vec{r}, \vec{q}_+; \frac{\epsilon}{2} + \epsilon') g^{(0)}(\vec{r}', \vec{q}_-; \frac{\epsilon}{2} - \epsilon') + g^{(0)}(\vec{r}, \vec{q}_+; \frac{\epsilon}{2} + \epsilon') \times \\ &\quad \left. g^{(2)}(\vec{r}', \vec{q}_-; \frac{\epsilon}{2} - \epsilon')] \right], \end{aligned} \quad (5.34)$$

und

$$\begin{aligned} K_b^{(2)} &= \frac{1}{2} K^{(0)} [\Lambda^{(0)} K^{(0)}]_L^{(2)} = \\ &= K_b^{(2)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = -\frac{1}{16} \int d^3 q d^3 q' K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) \times \end{aligned}$$

$$(\nabla_{\vec{R}} \nabla_{\vec{P}'} - \nabla_{\vec{P}} \nabla_{\vec{R}'})^2 \Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K^{(0)}(\vec{R}', \vec{P}'; \vec{q}', \vec{P}'; \epsilon) \Big|_{\substack{\vec{R}' = \vec{R}; \\ \vec{P}' = \vec{P}}} \quad (5.35)$$

Zunächst soll $K_a^{(2)}$ untersucht werden, das seinerseits aus zwei Anteilen besteht, die durch die beiden eckigen Klammern im Ausdruck (5.34) für $\Lambda^{(2)}$ gegeben sind.

Beim ersten, die Differentiationen enthaltenden Term ist festzuhalten, daß es sich bei dem Energieintegral über die beiden $g^{(0)}$ -Funktionen nicht um den LDA-Zweiteilchenpropagator (5.6b) handelt, da sich die beiden Teilchen an verschiedenen Orten $\vec{r}$ und $\vec{r}'$ befinden. Führt man diese Integration aus ($V(\vec{r}, \vec{p}) := \text{Re } M^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; E(\vec{r}, \vec{p}))$; $\vec{q}_{\pm} = \frac{\vec{p}}{2} \pm \vec{q}$):

$$i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi} g^{(0)}(\vec{r}, \vec{q}_+; \frac{\epsilon}{2} + \epsilon') g^{(0)}(\vec{r}', \vec{q}_-; \frac{\epsilon}{2} - \epsilon') =$$

$$\frac{N(\vec{P}, \vec{q}, p_F(R))}{\epsilon - \frac{p^2}{4m} - \frac{q^2}{m} - V(\vec{r}, \vec{q}_+) - V(\vec{r}', \vec{q}_-) + i\eta} \quad (5.36)$$

(Der Pauliprojektor N ist bereits mit der Schwerpunktskoordinate $\vec{R} = \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}$ geschrieben, da er generell nur in Thomas-Fermi-Näherung verwendet wird.), so sieht man, daß dieser Term den Umstand berücksichtigt, daß die Teilchen ein unterschiedliches Kernpotential verspüren. In (5.34) wird dieser Ausdruck um die Schwerpunktskoordinate $\vec{R}$ entwickelt. Durch Ausführung der Differentiationen wird man auf Ausdrücke geführt, die 2. und 3. Potenzen des Energienenners des Zweiteilchenpropagators enthalten. Sie besitzen damit die Struktur von Energieableitungen der $K^{(0)}$ -Matrix, die für höhere als die 2. Ordnung, i.e. 1. Energieableitungen, vernachlässigt werden können, vgl. Kapitel 4.4.3..

Dieselben Argumente lassen sich auf den zweiten Beitrag zu $\Lambda^{(2)}$, (5.34), anwenden, der die Modifikation des Zweiteilchenpropagators durch die Ein-

teilchenpropagator-Korrektur $g^{(2)}$ berücksichtigt. Die Ausführung des Integrals über die beiden Einteilchengreenfunktionen liefert Energienenner von 2., 3. und 4. Potenz, wovon wiederum nur die 2. Ordnung Berücksichtigung findet. Diese enthält den "Rückkopplungs"term $\hat{M}^{(2)-HF}$, vgl. (4.56d).

Insgesamt erhält man für $K_a^{(2)}(\vec{q}_\pm = \frac{\vec{p}}{2} \pm \vec{q})$:

$$\begin{aligned} K_a^{(2)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = & -\frac{1}{2} \int d^3 q \left\{ \frac{1}{96} [(\Delta_q K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon)) K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon) - \right. \\ & 2(\nabla_q K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon))(\nabla_q K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon)) + K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) \times \\ & (\Delta_q K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon))] \times (\Delta_R E(\vec{R}, \vec{q}_+) + \Delta_R E(\vec{R}, \vec{q}_-)) + \\ & [K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon)] \times (\hat{M}^{(2)-HF}(\vec{R}, \vec{q}_+ + \\ & \left. \hat{M}^{(2)-HF}(\vec{R}, \vec{q}_-)) \right\} \times \frac{N(\vec{p}, \vec{q}, p_F(R))}{(\epsilon - E(\vec{R}, \vec{q}_+) - E(\vec{R}, \vec{q}_-) + i\eta)^2} . \quad (5.37) \end{aligned}$$

Die zweite Korrektur $K_b^{(2)}$ ist durch den Verlust der Translationsinvarianz bedingt. Man sieht dies am besten, wenn man die ursprüngliche Leitergleichung in der Impulsdarstellung betrachtet und den allgemeinen mit dem Kernmateriefall (KM) vergleicht:

$$K_{KM}(\vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = 2\bar{v}(\vec{p}, \vec{p}') + \int d^3 q \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \Lambda_{KM}(\vec{p}; \vec{q}; \epsilon) K_{KM}(\vec{p}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon) , \quad (5.38)$$

$$\begin{aligned} K(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = & 2\delta(\vec{p}-\vec{p}')\bar{v}(\vec{p}, \vec{p}') + \int d^3 q \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \int d^3 Q \Lambda(\vec{p}, \vec{Q}; \vec{q}; \epsilon) \times \\ & K(\vec{Q}, \vec{p}'; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon) . \quad (5.39) \end{aligned}$$

Im allgemeinen Fall hat man über alle in den Zwischenzuständen auftretenden Schwerpunktsimpulse zu integrieren, was im homogenen Fall (5.38) wegen der Schwerpunktsimpulserhaltung entfällt. Diese Möglichkeit eines

Schwerpunktsimpulsübertrages auf das umgebende Medium wird durch den zusätzlichen Term $K_b^{(2)}$ berücksichtigt.

Im Ortsraum läßt sich dieser Sachverhalt so interpretieren, daß in die Renormierung der Zweiteilchenwechselwirkung am Ort $\vec{R}$ nicht nur die Streuung der Teilchen an diesem Ort, sondern auch in einer gewissen Umgebung um diesen Punkt eingeht.

Behält man auch bei $K_b^{(2)}$ nur Energienenner 2. Ordnung bei, so gewinnt man den Ausdruck $(V(\vec{r}, \vec{p}) := \text{Re } M^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; E(\vec{r}, \vec{p})); \vec{q}_+ := \frac{\vec{p}}{2} + \vec{q})$:

$$K_b^{(2)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}', \epsilon) = -\frac{1}{48} f d^3 q K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) \{ [\Delta_R(V(\vec{R}, \vec{q}_+) + V(\vec{R}, \vec{q}_-))] \times \\ (\Delta_P K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon)) - 2[\nabla_R \nabla_P (V(\vec{R}, \vec{q}_+) + V(\vec{R}, \vec{q}_-))] \times \\ (\nabla_R \nabla_P K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon)) + [\frac{1}{2m} + \Delta_P (V(\vec{R}, \vec{q}_+) + V(\vec{R}, \vec{q}_-))] \times \\ (\Delta_R K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon)) \} \times \frac{N(\vec{P}, \vec{q}, p_F(R))}{(\epsilon - E(\vec{R}, \vec{q}_+) - E(\vec{R}, \vec{q}_-) + i\eta)^2} \quad (5.40)$$

Des weiteren findet man im Rahmen der bisher benutzten Näherungen durch Iteration die folgende Formulierung für die Ableitungen der $K^{(0)}$ -Matrix nach den Schwerpunktskoordinaten:

$$\nabla_R K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = \frac{1}{2} f d^3 q K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) [\nabla_R (E(\vec{R}, \vec{q}_+) + E(\vec{R}, \vec{q}_-))] \times \\ \frac{N(\vec{P}, \vec{q}, p_F(R))}{(\epsilon - E(\vec{R}, \vec{q}_+) - E(\vec{R}, \vec{q}_-) + i\eta)^2} K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \vec{q}, \vec{p}'; \epsilon) \quad ; \quad (5.41)$$

analoge Ausdrücke gelten für ∇_P , Δ_R und Δ_P .

Die Korrektur M^{II} zum optischen Potential erhält man schließlich aus (5.32):

$$M^{II}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = \kappa^2 \int d^3 q \left[K_a^{(2)}(\vec{r}, \vec{p} + \vec{q}; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}; \epsilon + E(\vec{r}, \vec{q})) + \right. \\ \left. K_b^{(2)}(\vec{r}, \vec{p} + \vec{q}; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}; \epsilon + E(\vec{r}, \vec{q})) \right] \theta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})) n_{\zeta}(\vec{r}, \vec{q}) \quad (5.42)$$

5.4. Korrekturen durch die Faltungsgleichung

Beim zuletzt zu untersuchenden Beitrag M^{III} , (5.5), handelt es sich um eine Korrektur, deren (partielle) Berücksichtigung in der Literatur als "verbesserte (improved)" LDA bezeichnet wird [JLM77b], vgl. Kapitel 3.4.. Formal entsteht dieser Beitrag aus der Entwicklung der Differentialoperatoren in (4.21c):

$$M^{III}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = -i f \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\eta\epsilon'} \frac{-\hbar^2}{32} \int d^3q \left\{ [(\nabla_q, -\nabla_q'')(\nabla_r, +2\nabla_{r''})]^2 \times \right. \\ \left. K^{(0)}(\vec{r}', \vec{p}+\vec{q}; \vec{q}', \vec{q}''; \epsilon+\epsilon') \mathcal{H}g^{(0)}(\vec{r}', \vec{q}; \epsilon') \right\}_{\substack{\vec{q}'=\vec{q}''=\frac{\vec{p}-\vec{q}}{2} \\ \vec{r}'=\vec{r}''=\vec{r}}} \quad (5.43)$$

Um die Natur dieses Beitrags besser zu verstehen, ist es günstig, die allgemeine Faltungsgleichung (4.22c):

$$M(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = -i f \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\eta\epsilon'} (2\pi\hbar)^{-3} \iiint d^3p d^3r d^3q e^{i\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \frac{\vec{q}-\vec{p}}{2}} \times \\ K\left(\frac{\vec{r}+\vec{r}'}{2}, \vec{p}+\vec{q}; \vec{r}-\vec{r}', \frac{\vec{p}}{2}, \vec{r}-\vec{r}', -\frac{\vec{p}}{2}; \epsilon+\epsilon'\right) g(\vec{r}', \vec{q}; \epsilon') \quad (5.44)$$

mit der entsprechenden Kernmaterie(KM)-Gleichung (=LDA-Gleichung):

$$M_{KM}(\vec{p}; \epsilon) = -i f \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\eta\epsilon'} (2\pi\hbar)^{-3} \iiint d^3p d^3s d^3q e^{i\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \frac{\vec{q}-\vec{p}}{2}} \times \\ K_{KM}(\vec{p}+\vec{q}; \vec{s}+\frac{\vec{p}}{2}, \vec{s}-\frac{\vec{p}}{2}; \epsilon+\epsilon') g_{KM}(\vec{q}; \epsilon') \quad (5.45)$$

zu vergleichen. K ist bezüglich der Relativkoordinaten in der Ortsdarstellung angegeben. Die Ähnlichkeit auch in den Ortsvariablen zwischen (5.44) und (5.45) tritt deutlich zutage, wenn man $\vec{s} = \vec{r} - \vec{r}'$ setzt.

Wendet man bei der Interpretation dieses Beitrags der Einfachheit halber

die Hartree-Fock-Näherung mit einer lokalen Wechselwirkung an, d.h.

$$K(\vec{R}, \vec{p}; \vec{r}, \vec{r}'; \epsilon) \longrightarrow 2 \bar{v}(\vec{r}, \vec{r}') = v(\vec{r}) [\delta(\vec{r} - \vec{r}') - \delta(\vec{r} + \vec{r}')] , \quad (5.46)$$

so ergibt die Integration über die Energie in (5.44) und (5.45) für M im Fall der Kernmateriegleichung:

$$M_{KM}(\vec{p}) = \rho_0 \int d^3 r' v(\vec{r} - \vec{r}') - (2\pi M)^{-3} \int d^3 r d^3 q e^{-\frac{i}{M} \vec{r}(\vec{p} - \vec{q})} v(\vec{r}) n(\vec{q}) , \quad (5.47)$$

während man für die allgemeine Gleichung:

$$M(\vec{r}, \vec{p}) = \int d^3 r' v(\vec{r} - \vec{r}') \rho(\vec{r}') - (2\pi M)^{-3} \int d^3 r' d^3 q e^{-\frac{i}{M} \vec{r}'(\vec{p} - \vec{q})} v(\vec{r}') n(\vec{r}', \vec{q}) \quad (5.48)$$

erhält. Für die "einfache" LDA werden in (5.47) die (Kernmaterie-)Dichte ρ_0 und die Impulsverteilungsfunktion $n(\vec{q})$ über $p_F(r)$ ortsabhängig gemacht.

Es zeigt sich, daß die jeweiligen Austauschsterme in (5.47) und (5.48) identisch sind. Die direkten Terme unterscheiden sich hingegen darin, daß das Potential v nur in (5.48) mit der Dichte ρ gefaltet wird. Diese Differenz läßt sich als typische Thomas-Fermi-Näherung - d.h. als Annahme lokal konstanter Mediumsverhältnisse - interpretieren, denn der Austauschterm in der allgemeinen Gleichung, in der die gemischte Dichte $n(\vec{r}, \vec{q})$ nur lokal am Ort $\vec{r}$ benötigt wird, wird auch schon von der LDA-Gleichung richtig beschrieben, während es im direkten Term der Kenntnis des gesamten Dichteverlaufs (oder doch zumindest in einer Umgebung des Punktes $\vec{r}$) bedarf; die LDA-Formulierung beschränkt sich jedoch auch hier auf den lokalen Wert der Dichte.

In der Literatur [JLM77b] ist diese Differenz als "endlicher Reichweite"-Effekt diskutiert worden, da die beiden Gleichungen (5.47) und (5.48) im

Fälle einer Punktkraft übereinstimmen. Die Autoren korrigieren daher ihr "einfaches" LDA-Ergebnis phänomenologisch durch Faltung mit einer Gauß-funktion, was insbesondere für die rms-Radien des optischen Potentials bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen liefert, vgl. Abschnitt 8..

Neben der Korrektur zu dieser Thomas-Fermi-Näherung an das Faltungsintegral wird mit (5.43) noch ein weiterer Effekt berücksichtigt. In Gleichung (5.44) für den allgemeinen Fall ist die Orts-Schwerpunktsvariable von $K^{(0)}$ durch $\frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}$ gegeben, also von der Integrationsvariablen $\vec{r}'$ abhängig. In der LDA-Gleichung (5.45) entspricht der Orts-Schwerpunktskoordinate alleine die Variable $\vec{r}$. Das bedeutet, daß bei der Integration über die Relativkoordinaten im allgemeinen Fall auch die veränderte Schwerpunktskoordinate zu berücksichtigen ist. Die LDA macht dies nicht, sondern nimmt auch hier konstante Verhältnisse für diese Variable an. Es handelt sich dabei um denselben Effekt der Möglichkeit eines Schwerpunktsimpulsübertrags auf das Medium, wie er schon in Kapitel 5.3. diskutiert wurde.

Zur Auswertung von (5.43) nimmt man zunächst die übliche Impulsmittelung vor; da hier die Relativimpulse betroffen sind, handelt es sich - abgesehen vom Spezialfall einer reinen S-Wellen-Wechselwirkung, für die die K-Matrix nur von den Impulsbeträgen abhängt - um eine echte Mittelung:

$$M^{III}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\eta\epsilon'} \frac{-\hbar^2}{32} \frac{1}{3} \int d^3q \{ [\Delta_{q'} - 2\nabla_{q'} \cdot \nabla_{q''} + \Delta_{q''}] \times \\ [(\Delta_r K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p} + \vec{q}; \vec{q}', \vec{q}''; \epsilon + \epsilon')) g^{(0)}(\vec{r}, \vec{q}; \epsilon')] + \\ 4(\nabla_r K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p} + \vec{q}; \vec{q}', \vec{q}''; \epsilon + \epsilon')) (\nabla_r g^{(0)}(\vec{r}, \vec{q}; \epsilon')) +$$

$$4K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p} + \vec{q}; \vec{q}', \vec{q}''; \epsilon + \epsilon') (\Delta_r g^{(0)}(\vec{r}, \vec{q}; \epsilon')) \Big|_{\vec{q}' = \vec{q}'' = \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}} . \quad (5.49)$$

Die Orts- und Impulsableitungen der $K^{(0)}$ -Matrix lassen sich leicht durchführen und sind, was die Ortsableitungen betrifft, bereits im vorherigen Kapitel 5.3. diskutiert worden.

Hinsichtlich der Behandlung der Ortsableitungen der Einteilchengreenfunktion und der Auswertung des Energieintegrals gilt dieselbe Argumentation wie in Kapitel 5.2.. Der Einteilchenpropagator wird als Summe aus dem retardierten Propagator g_r und der Spektralfunktion dargestellt; als Folge verschwindet das Energieintegral über g_r (dies gilt auch für die Ortsableitungen von g_r); die verbleibenden Terme haben die folgende Struktur:

$$\hat{m}_1(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = \int d\epsilon' \int d^3q f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{q}; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}; \epsilon + \epsilon') \times$$

$$D_1 [\theta(\epsilon_F(r) - \epsilon') A(\vec{r}, \vec{q}; \epsilon')], \quad l=1,2, \quad (5.50)$$

$$D_1 := \nabla_r, \quad D_2 := \Delta_r,$$

$$A(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = [n_>(\vec{r}, \vec{p}) \theta(E(\vec{r}, \vec{p}) - \epsilon_F(r)) + n_<(\vec{r}, \vec{p}) \theta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{p}))] \times$$

$$\delta(\epsilon - E(\vec{r}, \vec{p})) , \quad (5.51)$$

wobei die Funktion f für die verschiedenen Orts- und Impulsableitungen der $K^{(0)}$ -Matrix steht. Wie schon in Kapitel 5.2. werden nichtdefinierte Terme bei den Differentiationen der eckigen Klammer in (5.50) durch Addition eines infinitesimalen Inkrements δ im Argument der θ -Funktion vermieden.

Berücksichtigt man zudem die Näherung $\partial_r n \approx 0$, s. Kapitel 4.4.3., so verschwinden eine Reihe von Termen in (5.50), und die Ableitungen lassen

sich in folgender Weise formulieren (die Funktionsargumente sind der Übersichtlichkeit halber unterdrückt):

$$\nabla_{\mathbf{r}} [\Theta \times \mathbf{A}] = \delta(\epsilon_{\mathbf{F}} - \epsilon - \delta) (\nabla_{\mathbf{r}} \epsilon_{\mathbf{F}}) \mathbf{A} + \Theta(\epsilon_{\mathbf{F}} - \epsilon - \delta) (\nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{A}) , \quad (5.52)$$

$$\Delta_{\mathbf{r}} [\Theta \times \mathbf{A}] = \delta(\epsilon_{\mathbf{F}} - \epsilon - \delta) [(\Delta_{\mathbf{r}} \epsilon_{\mathbf{F}}) \mathbf{A} + 2(\nabla_{\mathbf{r}} \epsilon_{\mathbf{F}}) (\nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{A})] + \Theta(\epsilon_{\mathbf{F}} - \epsilon - \delta) \times \\ (\Delta_{\mathbf{r}} \mathbf{A}) + \delta'(\epsilon_{\mathbf{F}} - \epsilon - \delta) (\nabla_{\mathbf{r}} \epsilon_{\mathbf{F}})^2 \mathbf{A} ; \quad (5.53)$$

$$\nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{A} = - n_{<} \Theta(\epsilon_{\mathbf{F}} - E) (\nabla_{\mathbf{r}} E) \delta'(\epsilon - E) , \quad (5.54)$$

$$\Delta_{\mathbf{r}} \mathbf{A} = n_{<} \Theta(\epsilon_{\mathbf{F}} - E) [(\nabla_{\mathbf{r}} E)^2 \delta''(\epsilon - E) - (\Delta_{\mathbf{r}} E) \delta'(\epsilon - E)] . \quad (5.55)$$

Für $n_{<}(\vec{r}, \vec{q})$ ist wiederum der linksseitige Grenzwert $|\vec{q}| - \delta$ zu verwenden.

Zusammen mit den bereits in Kapitel 4.4.3. beschriebenen Näherungen zu den Energie- und Ortsableitungen der $K^{(0)}$ -Matrix liefert dies für $\hat{m}_1$, (5.50):

$$\hat{m}_1(\epsilon) = \int d^3q n_{<} [(\nabla_{\mathbf{r}}(\epsilon_{\mathbf{F}} - E)) f(\epsilon + E) \delta(\epsilon_{\mathbf{F}} - E - \delta) + (\nabla_{\mathbf{r}} E) \times \\ \dot{f}(\epsilon + E) \Theta(\epsilon_{\mathbf{F}} - E - \delta)] , \quad (5.56)$$

$$\hat{m}_2(\epsilon) = \int d^3q n_{<} [f(\epsilon + E) [(\Delta_{\mathbf{r}}(\epsilon_{\mathbf{F}} - E)) \delta(\epsilon_{\mathbf{F}} - E - \delta) + (\nabla_{\mathbf{r}}(\epsilon_{\mathbf{F}} - E))^2 \times \\ \delta'(\epsilon_{\mathbf{F}} - E - \delta)] + \dot{f}(\epsilon + E) [(\Delta_{\mathbf{r}} E) \Theta(\epsilon_{\mathbf{F}} - E - \delta) + 2(\nabla_{\mathbf{r}} E) (\nabla_{\mathbf{r}}(\epsilon_{\mathbf{F}} - E)) \times \\ \delta(\epsilon_{\mathbf{F}} - E - \delta)]] , \quad (5.57)$$

mit

$$\dot{f}(\epsilon + E) := \frac{\partial}{\partial \omega} f(\omega) \Big|_{\omega = \epsilon + E} . \quad (5.58)$$

Für die Massenoperatorkorrektur M^{III} , (5.43), erhält man somit:

$$\begin{aligned}
 M^{III}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) &= \frac{-\hbar^2}{96} \int d^3q \, n_{\leq}(\vec{r}, \vec{q}) \left\{ [\Delta_r k(\vec{r}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) + 4(\Delta_r E(\vec{r}, \vec{q})) \times \right. \\
 &\quad \left. k(\vec{r}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon)] \theta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})) + 4[(\nabla_r(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q}))) \times \right. \\
 &\quad \left. (\nabla_r k(\vec{r}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon)) + (\Delta_r(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q}))) k(\vec{r}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) + 2(\nabla_r E(\vec{r}, \vec{q})) \times \right. \\
 &\quad \left. (\nabla_r(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q}))) k(\vec{r}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon)] \delta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})) + \right. \\
 &\quad \left. 4[(\nabla_r(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})))^2 k(\vec{r}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon)] \delta'(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q})) \right\} , \quad (5.59)
 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
 k(\vec{r}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) &:= (\Delta_{q'} - 2\nabla_{q'} \nabla_{q''} + \Delta_{q''}) \times \\
 &\quad K^{(0)}(\vec{r}, \vec{p} + \vec{q}; \vec{q}', \vec{q}''; \epsilon + E(\vec{r}, \vec{q})) \Big|_{\vec{q}' = \vec{q}'' = \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}} . \quad (5.60)
 \end{aligned}$$

6. Die verwendete Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung

Als Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung wird ein separables S-Wellen-Potential verwendet. Die separable Form ermöglicht eine explizite, d.h. bis auf Quadraturen analytische Berechnung der $K^{(0)}$ -Matrix und läßt insbesondere in der numerischen Behandlung eine genaue Berechnung der verschiedenen, z.T. sehr umfangreichen und komplizierten Korrekturbeiträge zum optischen Potential zu. Für eine komplizierte lokale Wechselwirkung ist dies z.T. nicht möglich, so daß die Diskussion der Anteile der einzelnen Korrekturterme durch zusätzliche - eventuell verschiedene - Approximationen in der Berechnung der Beiträge belastet wäre.

Auch wenn man nicht erwarten kann, daß eine realistische Nukleon-Nukleon-Kraft durch einen einfachen separablen Ansatz vollkommen korrekt wiedergegeben wird - z.B. ist das "off-energy-shell"-Verhalten separabler Potentiale i.a. unbefriedigend -, so sind solche Wechselwirkungen doch immer wieder mit Erfolg in Kernmaterierechnungen angewandt worden [Sa76, Ta64, HK74, Pu61, We68, MH78]. Einen kurzen Überblick über die allgemeinen Eigenschaften separabler Wechselwirkungen findet man z.B. bei [RS80].

Eine weitere, in Hinblick auf die numerische Auswertung vorgenommene Vereinfachung stellt die Beschränkung der Wechselwirkung der beiden Nukleonen auf die relativen S-Zustände dar. Die benutzte Nukleon-Nukleon-Kraft besitzt damit eher schematischen Charakter; gleiche oder ähnliche Wechselwirkungen wurden in den Arbeiten von [Pu61, We68, MH78] angewandt. Ihre Berechtigung findet diese Vorgehensweise in der Tatsache, daß sich bei LDA-Rechnungen mit realistischen Wechselwirkungen für den Realteil des optischen Potentials die Beiträge höherer Partialwellen zu einem großen Teil wegheben [JLM74].

Beim Imaginärteil ist die Situation anders. Zwar liefern bei niedrigen

Energien auch hier die S-Partialwellen den entscheidenden Beitrag, die restlichen Partialwellen heben sich jedoch nicht gegenseitig auf [JLM74], vielmehr gewinnen für höhere Energien die P-Partialwellen zunehmend an Einfluß und sind im wesentlichen für das Anwachsen des Imaginärteils in diesem Bereich verantwortlich. Wie sich zeigen wird, nehmen jedoch die Korrekturen zur LDA für höhere Energien generell schnell ab, so daß der Bereich, in dem die P-Wellen bedeutend werden, für den hier untersuchten Gegenstand nur von kleinerem Interesse ist. Dies läßt auch für den Imaginärteil eine Beschränkung auf S-Wellen als gerechtfertigt erscheinen.

Für die explizite Behandlung der Leitergleichung wird die übliche Technik der Partialwellenentwicklung angewandt [WW71]. Unter der Voraussetzung, daß Isospin, Gesamtdrehimpuls, Gesamtspin und Parität Erhaltungsgrößen sind, läßt sich die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung v in folgender Weise formulieren:

$$\begin{aligned}
 v_{12,1'2'} &\equiv \langle \vec{p}, \vec{p}', \sigma_1 \tau_1, \sigma_2 \tau_2 | v | \vec{p}', \vec{p}', \sigma'_1 \tau'_1, \sigma'_2 \tau'_2 \rangle = \\
 &= \sum_{SM_S, TM_T} \sum_{S'M'_S, T'M'_T} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & S \\ \sigma_1 & \sigma_2 & M_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ \tau_1 & \tau_2 & M_T \end{pmatrix} \times \\
 &\quad \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & S' \\ \sigma'_1 & \sigma'_2 & M'_S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & T' \\ \tau'_1 & \tau'_2 & M'_T \end{pmatrix} \delta_{TT'} \delta_{M_T M'_T} \delta_{SS'} \delta_{M_S M'_S} \times \\
 &\quad \delta(\vec{p} - \vec{p}') \langle \vec{p}, SM_S, TM_T | v | \vec{p}', SM_S, TM_T \rangle, \quad (6.1)
 \end{aligned}$$

$$\langle \vec{p}, SM_S, TM_T | v | \vec{p}', SM_S, TM_T \rangle = \sum_{JMLL'} w_{SM_S}^{JLM}(\hat{p}) v_{LL'}^{JST}(p, p') w_{SM_S}^{JL'M}(\hat{p}')^*, \quad (6.2)$$

$$v_{LL'}^{JST}(p, p') = \langle M^J L S M_T^T | v(p, p') | M^J L' S M_T^T \rangle. \quad (6.3)$$

Die Transformationskoeffizienten $w_{SM_S}^{JLM}(\hat{p})$ sind mit den Eigenfunktionen zum Gesamtdrehimpuls:

$$y_{LS}^{JM}(\hat{p}) = \sum_{M_L M_S} \begin{pmatrix} L & S & J \\ M_L & M_S & M \end{pmatrix} y_{LM_L}(\hat{p}) |M_S^S\rangle \quad (6.4)$$

über die Beziehung

$$y_{LS}^{JM}(\hat{p}) = \sum_{M_S} |M_S^S\rangle w_{SM_S}^{JLM}(\hat{p}) \quad (6.5)$$

bzw.

$$w_{SM_S}^{JLM}(\hat{p}) = \langle M_S^S | y_{LS}^{JM}(\hat{p}) \quad (6.6)$$

verknüpft [Ne66]. Der Punkt in (6.6) repräsentiert ein inneres Produkt im Spinraum. Für die Kugelfunktionen $y_{LM_L}(\hat{p})$ gilt die Definition von Edmonds [Ed64] und für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten die übliche Condon-Shortley-Phasenkonvention [CS53].

Um dieselbe Entwicklung auch für die $K^{(0)}$ -Matrix vornehmen zu können, muß zunächst die bereits erwähnte, auf Brueckner und Gammel [BG58] zurückgehende Winkelmittelung über die Impulsvariable im Propagator Λ durchgeführt werden, da anderenfalls $K^{(0)}$ Nichtdiagonal-Matrixelemente bzgl. des Gesamtdrehimpulses besitzen würde:

$$\Lambda^{(0)}(\vec{p}_2 + \vec{q}; \vec{p}_2 - \vec{q}) \longrightarrow \Lambda^{(0)}(\vec{p}, q) := \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx \Lambda^{(0)}(\vec{p}_2 + \vec{q}; \vec{p}_2 - \vec{q}), \quad (6.7)$$

$$\text{mit } x := \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{pq}.$$

Für den Fall der BHF-Theorie nimmt $\Lambda^{(0)}$ die folgende Form an:

$$\Lambda^{(0)}(R, P; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \frac{\bar{N}(P, p, p_F(R))}{\epsilon - E(R, q_+) - E(R, q_-) + i\eta}, \quad (6.8)$$

$$\bar{N}(P, p, p_F(R)) = \begin{cases} 0 & f \leq 0 \\ f & 0 < f < 1 \\ 1 & f \geq 1 \end{cases}, \quad (6.9)$$

$$f = f(P, p, p_F(R)) = \frac{P^2/4 + p^2 - p_F^2(R)}{p_p}, \quad (6.10)$$

$$E(\vec{R}, \vec{q}_{\pm}) \longrightarrow E(R, q_{\pm}); \quad q_{\pm}^2 := \frac{P^2}{4} + p^2 \pm \frac{\bar{N}(P, p, p_F(R))}{\sqrt{3}} p_p. \quad (6.11)$$

Für die $K^{(0)}$ -Matrix gilt dann:

$$\langle \vec{p}, SM_S, TM_T | K^{(0)}(R, P; \epsilon) | \vec{p}', SM_S, TM_T \rangle = \sum_{JMLL'} w_{SM_S}^{JLM}(\hat{p}) [K^{(0)}]_{LL'}^{JST}(R, P; p, p'; \epsilon) w_{SM_S}^{JL'M*}(\hat{p}'). \quad (6.12)$$

Somit läßt sich die Leitergleichung für jede Partialwelle getrennt formulieren:

$$[K^{(0)}]_{LL'}^{JST}(R, P; p, p'; \epsilon) = v_{LL'}^{JST}(p, p') [1 - (-1)^{L'+S+T}] + \sum_{L''=0}^{\infty} \int dq q^2 v_{LL''}^{JST}(p, q) \Lambda^{(0)}(R, P; q; \epsilon) [K^{(0)}]_{L'L''}^{JST}(R, P; q, p'; \epsilon). \quad (6.13)$$

Der Faktor

$$1 - (-1)^{L'+S+T}$$

rührt von der Antisymmetrisierung der Wechselwirkung her.

Bei einer S-Wellen-Wechselwirkung sind nur diejenigen Entwicklungskoeffizienten von Null verschieden, für die $L = L' = 0$ gilt. (6.2) und (6.12,13) vereinfachen sich in diesem Fall beträchtlich:

$$\langle \vec{p}, SM_S, TM_T | v | \vec{p}', SM_S, TM_T \rangle = \frac{1}{4\pi} v_S(p, p') , \quad S = 0, 1 ; \quad (6.14)$$

wegen des Pauliprinzipis genügt die Klassifizierung durch den Gesamtspin S.
Für $K^{(0)}$ gilt:

$$\langle \vec{p}, SM_S, TM_T | K^{(0)}(R, P; \epsilon) | \vec{p}', SM_S, TM_T \rangle = \frac{1}{4\pi} K_S^{(0)}(R, P; p, p'; \epsilon) , \quad (6.15)$$

und die Leitergleichung lautet:

$$K_S^{(0)}(R, P; p, p'; \epsilon) = 2 v_S(p, p') + \int_0^\infty dq q^2 v_S(p, q) \times \\ \Lambda^{(0)}(R, P; q; \epsilon) K_S^{(0)}(R, P; q, p'; \epsilon) . \quad (6.16)$$

Die Lösung der Leitergleichung erweist sich für eine separable Wechselwirkung, bei der $v_{LL'}^{JST}$ in der Form

$$v_{LL'}^{JST}(p, p') = \sum_i (\lambda_{LL'}^{JST})_i (w_L^{JST}(p))_i (w_{L'}^{JST}(p'))_i \quad (6.17)$$

angesetzt wird, als relativ einfach, da das Problem auf Quadraturen zurückgeführt werden kann [Ta64].

Im Fall einer S-Wellen-Wechselwirkung mit einem attraktiven ($\lambda_{i=1}^S < 0$) und einem repulsiven ($\lambda_{i=2}^S > 0$) Anteil:

$$v_S(p, p') = \sum_{i=1,2} \lambda_i^S w_i^S(p) w_i^S(p') \quad (6.18)$$

gilt für $K^{(0)}$ [WW71]:

$$K_S^{(0)}(R, P; p, p'; \epsilon) = \sum_{i,j=1,2} C_{ij}^S(R, P; \epsilon) w_i^S(p) w_j^S(p') . \quad (6.19)$$

Die Koeffizienten C_{ij}^S genügen dem Gleichungssystem:

$$C_{ij}^S(R, P; \epsilon) = \lambda_i^S (2\delta_{ij} + \sum_{k=1,2} F_{ik}^S(R, P; \epsilon) C_{kj}^S(R, P; \epsilon)) , \quad (6.20)$$

$$F_{ij}^S(R, P; \epsilon) = \int_0^\infty dq q^2 w_i^S(q) \Lambda^{(0)}(R, P; q; \epsilon) w_j^S(q) , \quad (6.21)$$

dessen Lösung durch

$$C_{ij}^S(R, P; \epsilon) = \frac{2}{L^S(R, P; \epsilon)} \hat{C}_{ij}^S(R, P; \epsilon) , \quad (6.22)$$

$$\hat{C}_{11}^S(R, P; \epsilon) = \lambda_1^S [1 - \lambda_2^S F_{22}^S(R, P; \epsilon)] , \quad (6.23)$$

$$\hat{C}_{12}^S(R, P; \epsilon) = \hat{C}_{21}^S(R, P; \epsilon) = \lambda_1^S \lambda_2^S F_{12}^S(R, P; \epsilon) , \quad (6.24)$$

$$\hat{C}_{22}^S(R, P; \epsilon) = \lambda_2^S [1 - \lambda_1^S F_{11}^S(R, P; \epsilon)] , \quad (6.25)$$

$$L^S(R, P; \epsilon) = [1 - \lambda_1^S F_{11}^S(R, P; \epsilon)] [1 - \lambda_2^S F_{22}^S(R, P; \epsilon)] - \lambda_1^S \lambda_2^S [F_{12}^S(R, P; \epsilon)]^2 \quad (6.26)$$

gegeben ist.

Für die Formfaktoren w^S wird eine einfache Yukawa-Form gewählt:

$$w_i^S(p) = \frac{1}{p^2 + (a_i^S)^2} , \quad i = 1, 2 . \quad (6.27)$$

Diese Wechselwirkung wurde von Weigel und Wegmann [WW68] bei Kernmaterierechnungen im Rahmen der Λ -Theorien verwendet. Die Werte für die Parameter λ und α sind in Tabelle 1 zu finden.

Um den Einfluß eines "hard-core" in der Wechselwirkung zu untersuchen, wurde für einige Resultate die Rechnung auch mit dem Puffischen Potential [Pu61] durchgeführt. Es handelt sich hierbei ebenfalls um eine separable S-Wellen-Wechselwirkung; sie simuliert den "hard-core" durch eine "harte Schale":

$$v_S^{\text{Puff}}(p, p') = \lambda^S w_1^S(p) w_1^S(p') + \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda_C w_2^S(p) w_2^S(p') , \quad (6.28)$$

$$w_1^S(p) = \frac{1}{p^2 + (\alpha^S)^2}, \quad w_2^S(p) = \frac{\sin(pr_c)}{p}, \quad (6.29)$$

(Parameter s. Tabelle 2).

Die Koeffizientenfunktionen $\hat{C}_{ij}^S$ und L^S lauten für die Puff-Wechselwirkung:

$$\hat{C}_{11}^S(R, P; \epsilon) = -\lambda^S F_{22}^S(R, P; \epsilon), \quad (6.30)$$

$$\hat{C}_{12}^S(R, P; \epsilon) = \hat{C}_{21}^S(R, P; \epsilon) = \lambda^S F_{12}^S(R, P; \epsilon), \quad (6.31)$$

$$\hat{C}_{22}^S(R, P; \epsilon) = 1 - \lambda^S F_{11}^S(R, P; \epsilon), \quad (6.32)$$

$$L^S(R, P; \epsilon) = -F_{22}^S(R, P; \epsilon)[1 - \lambda^S F_{11}^S(R, P; \epsilon)] - \lambda^S [F_{12}^S(R, P; \epsilon)]^2. \quad (6.33)$$

Aufgrund der einfachen Struktur einer derart gewonnenen $K^{(0)}$ -Matrix lassen sich auch die komplizierten, Mehrfachintegrale und Differentiationen enthaltenden Ausdrücke für die Korrekturen zum Massenoperator (Kapitel 5.2.-5.4.) in einem relativ großen Umfang analytisch behandeln; der Aufwand, der für eine numerische Berechnung zu betreiben ist, kann so auf ein vertretbares Maß beschränkt werden.

7. Numerische Auswertung und Parameterwahl

In diesem Abschnitt werden die zum Zweck der numerischen Auswertung vorgenommenen Parametrisierungen diskutiert; hierzu gehört insbesondere die Behandlung der Wignerfunktion und des effektiven Einteilchenpotentials. Des weiteren müssen die Parameter für diejenigen Funktionen festgelegt werden, die sich nicht aus der Rechnung selbst ergeben. Es sind dies die Dichte bzw. der ortsabhängige Fermiimpuls und die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung; letztere ist bereits im vorangegangenen Abschnitt behandelt worden. Den Abschluß bilden einige Bemerkungen zum Computer-Code, mit dem die numerische Auswertung durchgeführt wurde.

In den Ausdrücken für die Korrekturterme zum optischen Potential treten sehr häufig erste und zweite Orts- und Impulsableitungen des effektiven Einteilchenpotentials auf. Für dieses Potential ist nach (5.6) an sich der Realteil des selbstkonsistent bestimmten Einteilchenpotentials (für Energien unterhalb der Fermikante) zu verwenden. Da dies einen erheblichen numerischen Aufwand mit sich bringen würde und zudem insbesondere die zweiten Ableitungen aufgrund der numerischen Schwankungen mit einer gewissen Unsicherheit behaftet wären, wird das effektive Einteilchenpotential durch einen analytischen Ausdruck approximiert, der an den selbstkonsistent bestimmten Verlauf angepaßt ist.

Es handelt sich dabei um ein nichtlokales Potential vom Perey-Buck-Typ [PB62], dessen Impulsabhängigkeit, welche die Nichtlokalität ausdrückt, durch eine Gaußfunktion beschrieben wird, während die Ortsabhängigkeit durch eine Fermifunktion (Woods-Saxon-Potential) gegeben ist:

$$V^{PB}(r,p) = V_0 \left[1 + e^{\frac{r-R}{a_0}} \right]^{-1} e^{-\left(\frac{B}{2\hbar}\right)^2 p^2}, \quad (7.1)$$

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad A: \text{Nukleonenzahl}.$$

Es sind somit für jeden Ort r die Potentialtiefe V_0 und der Nichtlokalitätsparameter β in einer Kernmaterie-Rechnung an das selbstkonsistente Einteilchenpotential anzupassen. Als Fixpunkte werden hierfür die Impulse $p = 0$ und $p = p_F$ verwendet. In Abbildung 2 werden die selbstkonsistent errechneten Werte für zwei Orte (Kernoberfläche und Kerninneres) mit dem parametrisierten Verlauf verglichen. Die Übereinstimmung ist gut; erst für höhere Impulse ergibt sich eine Differenz von einigen MeV, die jedoch gegenüber der jeweils noch hinzutretenden kinetischen Energie klein ist.

Bei der Ortsfunktion müssen der Reichweiteparameter r_0 und die Oberflächenkonstante a_0 festgelegt werden. In Abbildung 4 sind wieder der parametrisierte Verlauf und die selbstkonsistent errechneten Werte für zwei Impulse ($p = 0$ und $p = p_F$) eingetragen. Auch hier zeigt sich eine gute Übereinstimmung, abgesehen vom Bereich sehr kleiner Dichten, für den allerdings die selbstkonsistente Rechnung aus den bereits erwähnten Gründen nicht sehr verlässlich ist (das effektive Einteilchenpotential wird für Energien unterhalb der Fermikante benötigt; für kleine Dichten wird die Rechnung in diesem Energiebereich jedoch wegen der Nähe des Deuteronpols unsicher ("virtuelle Deuteron-Produktion") [GBR79]; s. Kapitel 5.1.). Die Zahlenwerte für die Parameter des Perey-Buck (PB)-Potentials sind in Tabelle 3 zu finden.

Eine rechentechnische Schwierigkeit ergibt sich für die so vorgenommene Parametrisierung des Einteilchenpotentials bei der Auswertung des Korrekturterms M^I (Kapitel 5.2.). Die Impulsvariable des PB-Potentials beinhaltet sowohl die Energie- als auch die Impulsabhängigkeit des Realteils des verallgemeinerten optischen Potentials; für die Koeffizientenfunktionen B_2 und B_3 des Terms M^I werden jedoch die reinen Impulsableitungen benö-

tigt (für $p < p_F$). Um sie aus der Impulsabhängigkeit des PB-Potentials herauszupräparieren, wird die Verknüpfung der effektiven Masse m^* mit der E-Masse $\bar{m}$ und der k-Masse $\hat{m}$ ausgenützt [JLM76]:

$$\frac{m^*}{m} = \frac{\bar{m}}{m} \cdot \frac{\hat{m}}{m}, \quad (7.2)$$

mit den Definitionen ($V := \text{Re } M^{(0)}$):

$$\frac{m^*}{m} := \frac{p}{m} \left[\frac{dE}{dp} \right]^{-1}, \quad (7.3)$$

$$\frac{\bar{m}}{m} := \left[1 - \frac{\partial V}{\partial \epsilon} \right]_{\epsilon=E}, \quad (7.4)$$

$$\frac{\hat{m}}{m} := \left[1 + \frac{m}{p} \frac{\partial V}{\partial p} \right]_{\epsilon=E}^{-1}, \quad (7.5)$$

$$E \equiv E(p) = \frac{p^2}{2m} + V(p; \epsilon=E(p)). \quad (7.6)$$

(Die Ortsvariable wird in diesem Zusammenhang nicht benötigt.)

Die Wignerfunktion $n(p)$ hängt mit der E-Masse $\bar{m}$ über die Beziehung

$$\frac{\bar{m}}{m} = n^{-1} \quad (7.7)$$

zusammen (s. (3.24,26)).

Da die Wignerfunktion explizit und selbstkonsistent errechnet wird, kann man (7.7) und (7.2-5) ausnützen, um einen Ausdruck für die partielle Impulsableitung zu gewinnen:

$$\frac{\partial V}{\partial p} = \frac{1}{n} \left[\frac{dV}{dp} + \frac{p}{m} (1-n) \right]. \quad (7.8)$$

Mit der Näherung $\partial_p n \approx 0$ gilt für die zweite Ableitung;

$$\frac{\partial^2 V}{\partial p^2} \approx \frac{1}{n} \left[\frac{d^2 V}{dp^2} + \frac{1}{m} (1-n) \right]. \quad (7.9)$$

Aus (7.8) und (7.9) ist deutlich zu erkennen, daß $n(p)$ ein Maß für die

Energieabhängigkeit des Einteilchenpotentials ist: für $n = 1$ sind totale und partielle Impulsableitung gleich.

Die Impulsverteilungsfunktion $n(r,p)$ wird bis zu Dichtewerten von etwa 15% der Mittelpunktssdichte in ihrer selbstkonsistent errechneten Form verwendet, siehe Abbildung 3. Für kleinere Dichten wäre diese Vorgehensweise aus den bereits beschriebenen Gründen ungenau. Es wird daher für den Restbereich eine Parametrisierung der Wignerfunktion vorgenommen, die $n(r,p)$ für große r stetig in den asymptotischen Wert $n = 1$ überführt, den sie für den Fall eines verschwindenden Einteilchenpotentials annimmt. Die Ortsabhängigkeit der Wignerfunktion besitzt dann in etwa den Verlauf, wie man ihn aus semimikroskopischen Dispersionsbeziehungsrechnungen für das optische Potential erhält [MN84].

Zur Festlegung des ortsabhängigen Fermiimpulses muß die Dichte vorgegeben werden. Es wird hierfür eine auf Negele [Ne70] zurückgehende Parametrisierung verwendet, die sich in LDA-Rechnungen bewährt hat [Sa76, JLM77b]:

$$\begin{aligned} \rho(r) &= \rho_0 \left[1 + e^{\frac{r-R}{a_0}} \right]^{-1} , \\ R &= (r_0 + r_0^1 A^{1/3}) A^{1/3} , \\ \rho_0 &= 3A [4\pi R^3 (1 + \pi^2 a_0^2 R^2)]^{-1} , \end{aligned} \quad (7.10)$$

(A: Nukleonenzahl; Zahlenwerte: s. Tabelle 4) .

Um die Konsistenzbedingung (5.14) zu erfüllen, wird der Fermiimpuls $p_F(r)$ nicht mittels der Fermigasbeziehung (3.41) bestimmt, sondern direkt durch:

$$\frac{4}{(2\pi\hbar)^3} \int_{|\vec{p}| < p_F(r)} d^3p \, n(\vec{r}, \vec{p}) = \rho(r) . \quad (7.11)$$

Der resultierende Fermiimpuls weicht von der Fermigasform (3.41) nur um

wenige Prozent ab, abgesehen vom Bereich kleiner Dichten, in dem die Differenz etwa 10% beträgt, vgl. Tabelle 5. Der Verlauf des derart gewonnenen Fermiimpulses (genauer: der kinetischen Energie $p_F^2(r)/2m$ an der Fermikante) ist in Diagramm 4 eingetragen.

Des weiteren ist dort auch die Kurve für die lokale Fermienergie $\epsilon_F(r)$ zu finden, welche sich aus

$$\epsilon_F(r) = \frac{p_F^2(r)}{2m} + V^{PB}(r, p_F(r)) \quad (7.12)$$

ergibt, vgl. Kapitel 5.1.. Der Wert von $\epsilon_F = -20$ MeV für das Kerninnere liegt tiefer als der zu erwartende Kernmateriewert -16 MeV. Als Grund ist das Fehlen des Korrelationsterms anzuführen, der für diesen Energiebereich einen beträchtlichen Beitrag liefert [JLM77b, HS85b].

Eine letzte Bemerkung betrifft den Triplett-Anteil der $K^{(0)}$ -Matrix. An sich ist die 3S_1 -Partialwelle wegen des Tensoranteils der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung mit der 3D_1 -Partialwelle gekoppelt; wegen der Beschränkung auf S-Wellen entfällt dieser Anteil hier jedoch. In Kernmaterierechnungen mit realistischen Wechselwirkungen ergeben die 1S_0 - und die 3S_1 - 3D_1 -Partialwellen etwa dieselben Beiträge [JLM74]. Da sich im vorliegenden Fall der Triplett-Anteil als um 1/4 größer als der Singulett-Anteil herausgestellt - was auf das Fehlen der D-Welle zurückzuführen ist -, wurde der 3D_1 -Beitrag pauschal durch Multiplikation der 3S_1 -Partialwelle mit dem Faktor "3/4" berücksichtigt.

Nachdem somit die als Eingabe notwendigen Größen festgelegt sind, besteht die Vorgehensweise bei der praktischen Berechnung der Korrekturen zum optischen Potential in folgenden Schritten:

Zunächst führt man eine selbstkonsistente BHF-Rechnung ("continuous

choice") für den Realteil des effektiven Einteilchenpotentials in LDA-Näherung durch (für Energien unterhalb der Fermikante); zusätzlich zur Standard-BHF wird die Wignerfunktion $n(r,p)$ mit in die Rechnung einbezogen. Sodann ermittelt man das für die Parametrisierung des Realteils zu benutzende Perey-Buck-Potential. Mit dessen Hilfe lassen sich daraufhin sowohl die LDA-Version des optischen Potentials als auch die zugehörigen Korrekturen errechnen. Aufgrund der speziellen Formulierung der Theorie sind hierbei keine Integralgleichungen mehr zu lösen.

Die Rechnungen für die in dieser Arbeit präsentierten numerischen Ergebnisse wurden auf der CDC-Rechenanlage Cyber 175-875 des Leibniz-Rechenzentrums in München durchgeführt.

Die Standard-BHF-Aufgabe, die es zunächst zu lösen gilt, gestaltet sich in bezug auf die Rechencode-Anforderungen wegen der speziellen Wahl der Wechselwirkung und des Selbstkonsistenz-Kriteriums als relativ einfach. Der Rechenzeitbedarf für die Bestimmung eines Werts des effektiven Einteilchenpotentials für einen Ort und einen Impuls beträgt durchschnittlich 17 sec. Ein Matricelement des optischen Potentials in LDA-Näherung (Real- oder Imaginärteil) für einen Orts- und einen Energiewert benötigt ca. 4 sec; diese kürzere Zeit ergibt sich aus dem Umstand, daß jetzt das parametrisierte effektive Einteilchenpotential verwendet wird.

Ein deutlich höherer Rechenzeitbedarf besteht für die verschiedenen Korrekturterme zum optischen Potential. Insbesondere die Beiträge MIIa,b sind sehr aufwendig, da eine große Zahl von $K^{(0)}$ -Matrixelementen zu bestimmen ist. Je nach Art der Korrektur ist die Rechenzeit um einen Faktor 5-10 größer.

Der Kernspeicherbedarf für die Berechnung eines Korrekturterms beläuft sich auf etwa 100000 "CM-Words" (oktal). Aus Gründen der Rechenbedarfs-

kontingentierung wurde auf die Einhaltung dieses Werts geachtet, selbst wenn sich dies in einer Vergrößerung der Rechenzeit auswirkte.

8. Numerische Ergebnisse und Diskussion

In Kapitel 8.1. werden die numerischen Ergebnisse für die einzelnen Korrekturen der semiklassischen Entwicklung des optischen Potentials präsentiert; die physikalische Natur der Korrekturterme ist bereits in den Kapiteln 5.2.-4. diskutiert worden. Um ein definiertes Beispiel zu haben, wurden alle Rechnungen für die Nukleonenzahl $A = 208$ durchgeführt. Die Ergebnisse haben jedoch allgemeine Gültigkeit, da hier die Kernoberfläche untersucht wird und sich Atomkerne als leptoderme Systeme im Oberflächenbereich nur wenig unterscheiden. Auf den Einfluß A -abhängiger Effekte wird zum Abschluß des ersten Kapitels eingegangen. Bei allen Ergebnissen in diesem Abschnitt - LDA-Version wie Korrekturen - wird stets der lokal-äquivalente "on-energy-shell"-Wert der jeweiligen Größe angegeben, vgl. Kapitel 5.1., Gl. (5.11).

Welche Änderungen sich für das optische Potential durch die Berücksichtigung der Korrekturen ergeben, wird in Kapitel 8.2. diskutiert. Ein direkter Vergleich mit phänomenologischen Parametrisierungen des Proton- oder Neutron-optischen Potentials für ^{208}Pb ist nicht möglich, da in die vorliegende Arbeit isospinabhängige Effekte nicht miteinbezogen sind. Mit Hilfe von Systematiken der phänomenologischen Parametrisierungen, welche die Potentialparameter in Abhängigkeit von Energie, Nukleonenzahl, Kernladungszahl usw. angeben, läßt sich jedoch der isoskalare Anteil herauspräparieren; ein Vergleich wird auf diese Weise ermöglicht. Ebenso werden die hier erzielten Ergebnisse mit den Resultaten der bereits erwähnten anderen theoretischen Methoden verglichen.

Dasselbe gilt für die sich anschließende Untersuchung der Volumenintegrale und rms-Radien, die - neben dem Fall $A = 208$ - auch für $A = 40$ und $A = 120$ berechnet werden.

Die Wahl der (doppelt-)magischen Nukleonenzahlen hat ihren Grund darin, daß es sich dann um sphärische bzw. fastsphärische Kerne handelt, für welche die "Struktur"-Effekte am kleinsten sind. Deformierte Kerne hingegen haben niedrigliegende kollektive Zustände, die stark an den Grundzustand gekoppelt sind. Die inelastischen Wirkungsquerschnitte sind daher groß, und es wird entsprechend viel Fluß aus dem elastischen Kanal genommen. Dieser typische "Struktur"-Effekt wird von einer "Kernmaterie"-Rechnung nur ungenügend erfaßt (s. Einleitung). Ein Vergleich mit experimentellen Daten ist daher am ehesten für sphärische Kerne möglich.

Der Abschnitt schließt mit einer Zusammenfassung der in der vorliegenden Arbeit erzielten Ergebnisse.

8.1. Numerische Ergebnisse für die einzelnen Korrekturen

Als Korrektur, welche aus der semiklassischen Entwicklung der Faltungsgleichung entspringt, enthält der Term M^{III} im wesentlichen jene Beiträge, die durch die phänomenologische Verbesserung der LDA [JLM77b] berücksichtigt werden, vgl. Kapitel 5.4.. Diese besteht (für den Realteil des optischen Potentials) in einer Vergrößerung der Diffusität, d.h. der Oberflächendicke des Potentialtopfs - dieser Potentialbereich wird im weiteren öfters kurz als "Oberfläche" des Potentials bezeichnet - bei nur leicht veränderter Reichweite; beim Imaginärteil wird der Bereich der Oberflächenabsorption vergrößert.

In Abb. 5 ist der Realteil von M^{III} für verschiedene Energien zwischen 10 und 100 MeV aufgetragen. Man erkennt die typische Form einer Krümmungskorrektur, d.h. sie ergibt sich aus der Krümmung der Potentialkurve (2. Ortsableitung des effektiven Einteilchenpotentials). Das Vorzeichen wechselt von positiv nach negativ bei einem r -Wert, der etwas größer als der Halbdichteradius R ist und dem Halbwerttradius des Potentials entspricht (Wendepunkt der Potentialkurve). Die Korrektur ist auf den Oberflächenbereich von etwa ± 2 fm um den Wendepunkt beschränkt. Ihr Betrag bewegt sich in der Größenordnung von einigen MeV (im Maximum/Minimum) und nimmt mit wachsender Einschußenergie ab.

Auf das Einteilchenpotential hat dieser Korrekturverlauf genau die erwartete Wirkung. Im inneren Oberflächenbereich (links des Wendepunkts) führt der hier repulsive Charakter der Korrektur zu einer Verringerung der Potentialtiefe, während im äußeren Bereich (rechts des Wendepunkts) die Korrektur anziehend ist und das Potential verstärkt. Als Folge ergibt sich ein vergrößerter Oberflächenbereich bei gleichbleibender Reichweite.

Der Imaginärteil (Abb. 6) besitzt im wesentlichen denselben Krümmungscha-

rakter wie der Realteil. Allerdings ist der Absolutbetrag der Korrektur deutlich kleiner; dies gilt insbesondere für den inneren Bereich. Der Grund hierfür ist in der Wirkung des Pauliprinzips zu suchen, das die Zahl der inelastischen Kanäle einschränkt und mit zunehmender Dichte, d.h. kleiner werdenden r -Werten, immer mehr zum Tragen kommt. Es handelt sich dabei um denselben Mechanismus, der auch schon beim LDA-Beitrag die Oberflächenabsorptionsform des Imaginärteils bewirkt (s. z.B. Abb. 26). Auf den Umstand, daß der Betrag der Korrektur im Unterschied zum Realteil mit wachsender Energie zunächst zunimmt, wird später bei der detaillierten Behandlung der Energieabhängigkeit eingegangen.

Der Korrekturterm M^{Ia} , der die semiklassische Entwicklung der Dichtematrix und die Energieabhängigkeit der $K^{(0)}$ -Matrix berücksichtigt, s. Kapitel 5.2., besitzt für den Realteil (Abb. 7) dieselbe Form wie der Term M^{III} . Auch hier erkennt man das typische Krümmungsverhalten, wobei festzustellen ist, daß der Betrag der Korrektur deutlich kleiner als bei M^{III} ist.

Im Unterschied dazu zeigt der Imaginärteil (Abb. 8), zumindest für Energien unter 50 MeV, einen qualitativ anderen Verlauf. Die Korrektur ist über den ganzen Oberflächenbereich absorbierend (negativ) und hat damit den Charakter eines Gradiententerms, d.h. sie wird durch die erste Potentialableitung bestimmt. Der qualitativ unterschiedliche Verlauf von Real- und Imaginärteilkorrektur erklärt sich damit, daß verschiedene Summanden im Ausdruck (5.31) für die beiden Terme von Bedeutung sind. Während für den Realteil derjenige Ausdruck entscheidend ist, der die Potentialfunktion B_2 enthält, wird der Imaginärteil von dem Summanden dominiert, der proportional zu B_3 ist; am leichtesten sieht man den Unterschied zwischen B_2 und B_3 in der ETF-Form (A.5.10,11), bei der die Impulsableitungen vernachlässigt sind.

Der Beitrag M^{Ib} entsteht als "Rückkopplung" der Korrekturen des effektiven Einteilchenpotentials auf den Einteilchenpropagator (Kapitel 5.2.). In der hier benutzten Hartree-Fock-Näherung für diesen Term (vgl. Kapitel 4.4.2.) bestehen die Korrekturen aus den entsprechenden Ausdrücken der Realteile von M^{Ia} und M^{III} für Energien unterhalb der Fermikante. Da für diese kein wesentlicher Unterschied gegenüber den bereits behandelten Korrekturen M^{Ia} und M^{III} besteht, folgt M^{Ib} dem Verlauf dieser Beiträge, s. Abbn. 9 und 10.

Bemerkenswert ist die relative Größe der Korrekturen, insbesondere des Realteils. Er besitzt dieselbe Größenordnung wie M^{Ia} und M^{III} und ist in der Regel sogar größer als M^{Ia} . Dies bedeutet, daß bei der Bestimmung der semiklassischen Korrekturen der Einteilchengreenfunktion - und demnach auch bei der darauf aufbauenden Bestimmung der Dichtematrix und der Dichte - der "Rückkopplungs"-Term $\hat{M}^{(2)-HF}$ (s. (4.59)) immer berücksichtigt werden sollte. Diese Feststellung hat insbesondere eine Auswirkung auf die ETF- und verwandte Theorien, die die semiklassische Entwicklung des Einteilchenpropagators als Grundlage besitzen. Wenn auch durch die Verwendung eines "effektiven", nicht mikroskopisch bestimmten Einteilchenpotentials in diesen Theorien der "Rückkopplungs"-Term pauschal mitberücksichtigt ist, erscheint es für detaillierte Untersuchungen doch nützlich, diesen Beitrag explizit zu behandeln.

Die Korrekturen M^{IIa} und M^{IIb} können gemeinsam behandelt werden. Sie entstehen durch die semiklassische Entwicklung der $K^{(0)}$ -Matrix, s. Kapitel 5.3.. In den Abbn. 11 - 14 sind wiederum Real- und Imaginärteil der Korrekturen für verschiedene Energien aufgetragen.

Das auffallendste Moment in allen Diagrammen ist die geringe Größe sowohl des Real- als auch des Imaginärteils bei beiden Beiträgen. Des weiteren

läßt sich feststellen, daß beide Korrekturen mit wachsender Energie sehr schnell verschwinden; ist M^{IIa} bei etwa 50 MeV schon praktisch vernachlässigbar, so ist M^{IIb} bereits bei 30 MeV kaum noch zu bemerken.

Die uneinheitliche, nicht einem Krümmungs- oder Gradientenverlauf entsprechende Ortsabhängigkeit von M^{IIa} entspringt daraus, daß M^{IIa} aus einer Summe z.T. konkurrierender und ein unterschiedliches Energieverhalten aufweisender Terme zusammengesetzt ist.

In Abb. 15 ist der Realteil der Summe der Korrekturen ($M(2) = M^{Ia} + M^{Ib} + M^{IIa} + M^{IIb} + M^{III}$) für die verschiedenen Energien aufgetragen. Er zeigt die typische Krümmungsform, wie sie bereits bei den Einzelkorrekturen diskutiert wurde. Abgesehen vom Bereich kleiner Energien erweist sich der repulsive Anteil als deutlich größer im Vergleich zum attraktiven Anteil bei größeren r -Werten. Die Korrekturen werden mit zunehmender Energie kleiner und betragen bei $E = 100$ MeV noch knapp 3 MeV (für $r \approx 6$ fm) bzw. -1.5 MeV (für $r \approx 8$ fm).

Ein anderes Erscheinungsbild bietet der Imaginärteil (Abb. 16). Hier dominiert der negative (absorbierende) Anteil bei $r \approx 8$ fm. Als Grund hierfür wurde bereits beim Term M^{III} das Pauliblocking diskutiert.

Das Energieverhalten ähnelt dem des Realteils.

In den Abbn. 17 - 20 ist die Energieabhängigkeit der einzelnen Korrekturen für die zwei Orte $r \approx 6$ fm und $r \approx 8$ fm explizit angegeben. Die beiden r -Werte liegen in etwa symmetrisch zum Wendepunkt des LDA-Potentials an den Orten mit den größten positiven bzw. negativen Korrekturen, wenn man von $\text{Im } M^{Ia}$ absieht, das Gradientencharakter und damit ein Maximum bei $r \approx 7$ fm besitzt.

Die Korrekturen des Realteils sind bei $r = 6$ fm positiv (bis auf M^{II}) und nehmen mit wachsender Energie stetig ab. Dies liegt daran, daß mit höheren Einschußenergien die Projektilwellenlänge kleiner und damit die lokale Beschreibung der Streuung durch die LDA alleine in zunehmendem Maße besser wird. Die Größe von M^{Ib} und M^{III} (Realteil) beträgt bei $E = 100$ MeV etwa 1 MeV, während die restlichen Korrekturen hier praktisch schon verschwunden sind.

Von diesem Verlauf unterscheiden sich die jeweiligen Imaginärteile in qualitativer und quantitativer Hinsicht. Zum einen ist die Größe der Korrekturen durchwegs geringer, und zum anderen läßt sich für den Energiebereich unter 50 MeV ein Ansteigen feststellen. Der Grund hierfür liegt wiederum in der Wirkung des Pauliprinzip. Ebenso wie die Verringerung der Dichte führt die Erhöhung der Einschußenergie des Projektils zu einer Zunahme der Möglichkeit inelastischer Streuung und somit zu einer Vergrößerung des Imaginärteils. In den Abbn. 26 und 28 ist dieser Effekt auch an der LDA-Version des Imaginärteils zu beobachten.

Bei $r = 8$ fm besitzt das Pauliprinzip aufgrund der geringen Dichte kaum noch Einfluß, und Real- und Imaginärteil der Korrekturen ähneln sich (Abbn. 19 und 20). Sie sind hier negativ und nehmen mit wachsender Energie ab; bei $E = 100$ MeV ist ihr Betrag auf deutlich unter 1 MeV abgesunken.

Für kleine Energien ($E < 15$ MeV) ist ein starkes Anwachsen der Korrekturen mit fallender Energie zu beobachten. Man befindet sich hier - bei sehr niedrigen Dichten ($< 10\%$ der Mittelpunktsdichte) und niedrigen Energien - in demjenigen Bereich, in dem bei der Auswertung des Faltungsintegrals der Deuteronbindungspol der $K^{(0)}$ -Matrix zunehmend an Einfluß gewinnt. Da dieser Bereich in der vorliegenden Arbeit nur näherungsweise behandelt wird (s. Kapitel 5.1.), die Ergebnisse mit fallender Energie also unzuver-

lässiger werden, sind sie nur bis $E = 10$ MeV angegeben.

Zur Illustration der Änderungen, die durch die Verwendung einer anderen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung entstehen, wurde die Rechnung für die Energie $E = 20$ MeV zusätzlich mit dem Puff-Potential [Pu61] durchgeführt. Es handelt sich dabei ebenfalls um eine separable S-Wellen-Wechselwirkung, die jedoch im Unterschied zur relativ "weichen" Wechselwirkung von [WW68] mittels einer "harten Schale" den "hard core" realistischer Wechselwirkungen simuliert, vgl. Abschnitt 6..

In den Abbn. 21 und 22 sind Real- und Imaginärteil der Summe der Korrekturen $M(2)$ für die beiden Wechselwirkungen wiedergegeben. Die Kurven unterscheiden sich in beiden Fällen nur wenig, woraus sich schließen läßt, daß bei der Verwendung einer realistischeren Wechselwirkung durch den "hard core" keine wesentlichen Modifikationen gegenüber den hier präsentierten Ergebnissen zu erwarten sind. Da die Propagatorintegrale der Puff-Wechselwirkung deutlich langsamer konvergieren und daher eine entsprechend größere Rechenzeit benötigen, wurde auf die durchgängige Berechnung aller Ergebnisse mit dieser Wechselwirkung verzichtet.

Eine letzte Anmerkung gilt der A-Abhängigkeit der Korrekturen. Da sie stark von Krümmungstermen bestimmt werden, ist eine Abnahme der Größe der Korrekturen mit wachsender Nukleonenzahl A zu erwarten, da mit A gleichzeitig der Kernradius größer und somit die Oberflächenkrümmung kleiner wird. Diese Überlegung wird durch die Rechnung bestätigt. In den Abbn. 23 und 24 ist die Summe der Korrekturen bei der Energie $E = 30$ MeV für die Nukleonenzahlen $A = 40, 120$ und 208 aufgetragen. Die Ortsvariable ist auf den jeweiligen Halbdichteradius R normiert (s. Tabelle im Diagramm). Die Abnahme der Korrekturbeträge ist für negative Werte der Ortsvariable deut-

lich zu bemerken, während dieser Trend für positive Werte nicht sehr ausgeprägt ist; für $A = 208$ kehrt er sich sogar um. Dies ist wahrscheinlich darauf zurückzuführen, daß die Korrekturen nicht reinen Krümmungscharakter besitzen.

8.2. Numerische Ergebnisse für das optische Potential

In den Abbn. 25 - 28 werden Real- und Imaginärteil der LDA-Version des optischen Potentials $M^{(0)}(r,E)$ mit der veränderten Potentialform $M(r,E)$ verglichen, die sich durch Einbeziehung der Korrekturen ergibt. Der Realteil von $M^{(0)}$ besitzt die typische Woods-Saxon-ähnliche Form, die sich im wesentlichen aus dem vorgegebenen Dichteverlauf ergibt. Die Korrekturen bewirken eine Veränderung der Oberflächenregion. Im Übergangsbereich vom Kerninnern zur Oberfläche wirken die Korrekturen zunächst repulsiv und verringern so die Tiefe des Potentials. Etwa beim Halbwertsdurchmesser ($\hat{=}$ Wendepunkt) des LDA-Potentials werden die Korrekturen negativ und verstärken den attraktiven Potentialcharakter, wodurch die Reichweite des äußeren Randbereichs leicht vergrößert wird. Insgesamt bewirken die Korrekturen eine Vergrößerung der Oberflächendicke, während der Halbwertsdurchmesser (als Maß für die Reichweite) in etwa gleich bleibt.

Wie bereits diskutiert wurde, nehmen die Korrekturen mit wachsender Energie ab, die vergrößerte Diffusität des Potentialtopfs ist jedoch auch bei $E = 100$ MeV noch zu beobachten (Abb. 27).

Auch beim Imaginärteil beschränken sich die von den Korrekturen verursachten Änderungen auf den Oberflächenbereich. Sie bewirken für Energien bis zu $E = 50$ MeV eine deutliche Vergrößerung der Oberflächenabsorption und gleichzeitig - auch für Energien über 50 MeV - eine merkliche Vergrößerung der Reichweite (vom Bereich kleiner Energien abgesehen, vgl. " $E = 10$ MeV" in Abb. 26). Der Bereich, über dem sich die verstärkte Oberflächenabsorption beobachten läßt, wird hingegen nur unwesentlich verbreitert.

Durch den Vergleich der hier erzielten Ergebnisse mit experimentellen Werten und den Resultaten anderer theoretischer Arbeiten wird im weiteren

die Güte der semiklassischen Entwicklung des mikroskopischen optischen Potentials überprüft.

Bei der Bestimmung phänomenologischer optischer Modell-Potentialdaten wird in der Regel von einer aus mehreren Termen bestehenden Woods-Saxon- (WS-) Parametrisierung ausgegangen [Ho71]:

$$U(r, E) = V(E) f_V(r) + i[W(E) f_W(r) - 4W_S(E) \frac{d}{dr} f_W(r)] . \quad (8.1)$$

Das komplexe Potential U ist energieabhängig und lokal; die Ortsabhängigkeit ist durch die WS-Formfaktorfunktionen

$$f_I(r) = \left(1 + e^{\frac{r-R_I}{a_I}} \right)^{-1} , \quad R_I = r_I A^{1/3} , \quad I = V, W \quad (8.2)$$

gegeben. Der zweite Anteil des Imaginärteils besitzt eine "Ableitungs"-WS-Form und liefert den Oberflächenabsorptionsterm. Da in dieser Arbeit weder Coulomb- noch Polarisisationseffekte untersucht werden, sind das üblicherweise zusätzlich in (8.1) auftretende Coulomb- und das Spin-Bahn-Potential nicht berücksichtigt.

Die Potentialtiefen V , W und W_S sind energieabhängig und besitzen einen isovektoriellen Symmetrie- und einen Coulombkorrekturanteil. Die Coulombkorrektur berücksichtigt bei einem energieabhängigen Einteilchenpotential die Energieverschiebung, die das Coulombpotential für ein geladenes Teilchen bewirkt; der Symmetrieterm entsteht als Folge des isospinabhängigen Anteils der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung.

Für einen Vergleich mit den Ergebnissen dieser Arbeit sind nur die isoskalaren Beiträge von Bedeutung.

Bauer et al. [BHQ82] geben in einer umfangreichen Untersuchung von optischen Modell- und Einteilchenenergiedaten folgenden Ausdruck für die Tie-

fe des Realteils des effektiven Einteilchenpotentials (in MeV):

$$U = 52.4 - 0.37E + 0.0007E^2 + 24 \frac{N-Z}{A} + 0.4 \frac{Z}{A^{1/3}} . \quad (8.3)$$

Es läßt sich feststellen, daß die Energieabhängigkeit für niedrige und mittlere Energien sehr gut linear beschrieben werden kann (bei $E = 30$ MeV beträgt der E^2 -Term 0.63 MeV).

Als experimentelle Vergleichsdaten werden die Parameter von Becchetti und Greenlees [BG69] bzw. von Menet et al. [MGM71] verwendet, die in der ausführlichen Kompilation optischer Modell-Potentialdaten von Perey und Perey [PP76] angegeben sind. Sie sind in Tabelle 6 wiedergegeben; alle Angaben beziehen sich auf ^{208}Pb bzw. $A = 208$ und die Energie $E = 30$ MeV. Es wird unterschieden zwischen den isoskalaren und den "vollen" Werten der Parameter; letztere gelten für Proton- bzw. Neutronstreuung an ^{208}Pb .

Für die LDA-Rechnung läßt sich der Realteil des optischen Potentials gut mittels einer WS-Parametrisierung wiedergeben, während dies für den Fall "LDA + Korrekturen" nicht mehr zutrifft, vgl. den Potentialverlauf in Abb. 25. Um für den zweiten Fall dennoch einen, wenn auch groben Vergleich zu ermöglichen, wurde ein Parametersatz gesucht, der zumindest die Oberflächendicke und das Volumenintegral in etwa richtig wiedergibt (s. Tabelle 6). Brieva und Rook [Br77b], die im Rahmen einer Rechnung mit der "folded microscopic interaction"- (FMIA) Methode einen ähnlichen Potentialverlauf erhalten, verzichten in diesem Zusammenhang ganz auf die WS-Parametrisierung ihrer Resultate.

Die Potentialtiefe der LDA- bzw. "LDA + Korrekturen"-Rechnung stimmt gut mit den phänomenologischen Werten überein, die Reichweite ist dagegen zu klein. Hier macht sich die einfache Struktur der benutzten Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung nachteilig bemerkbar; die Beschränkung auf den S-Wel-

lenanteil führt zu einer ungenügenden Beschreibung der langreichweitigen Komponenten der Wechselwirkung [RS80] und daraus folgend zu einer zu kleinen Reichweite des Einteilchenpotentials. Der Vergleich mit dem LDA-Resultat von [JLM77b] zeigt, daß die Verwendung einer realistischen Wechselwirkung auch zu einer korrekten Beschreibung der Potentialreichweite führt.

Durch die semiklassischen Korrekturen wird die Reichweite sogar verkleinert, was jedoch im wesentlichen ein Effekt der für den Potentialverlauf inadäquaten Parametrisierung in WS-Form ist und daher nicht viel Aussagekraft besitzt.

An der Diffusitätskonstante a_V ist die bereits diskutierte Vergrößerung des Oberflächenbereichs durch die Korrekturen festzustellen. a_V nimmt um etwa 0.2 fm zu und erreicht damit den phänomenologischen Wert.

Für den Imaginärteil läßt sich die Parametrisierung (8.1,2) auch unter Einbeziehung der semiklassischen Korrekturen besser durchführen. Die Tiefe des Volumenterms der vorliegenden Rechnung stimmt mit den phänomenologischen Werten in etwa überein, während die Oberflächenterm-Tiefe als rein isoskalarer Beitrag zu groß ausfällt. Der Reichweiteparameter liegt mit $r_W = 1.30$ fm leicht unterhalb der experimentellen Ergebnisse; diese Differenz sollte bei Verwendung einer realistischen Wechselwirkung verschwinden - vgl. die Argumentation beim Realteil. Die Verkleinerung des Parameters a_W bei Einbeziehung der Korrekturen rührt daher, daß diese auf einen relativ schmalen Oberflächenbereich beschränkt sind und die Absorption verstärken, wodurch das Verhältnis von Oberflächenbreite und Potentialtiefe verändert wird. Dies wirkt sich bei einer WS-Parametrisierung in einer kleineren Oberflächenkonstante aus. Mit $a_W = 0.54$ fm liegt sie jedoch noch im Bereich der phänomenologischen Werte für den isoskalaren

Fall. Die starke Oberflächenverbreiterung durch die Isovektorkomponente (s. die "vollen" Werte für a_w) kann die vorliegende Rechnung naturgemäß nicht wiedergeben.

Insgesamt läßt sich festhalten, daß die semiklassischen Korrekturen das LDA-optische Potential in bezug auf die Oberfläche und die Reichweite mit der richtigen Tendenz verändern; ein genauerer Vergleich der Parameterwerte erscheint jedoch aus den folgenden Gründen als nicht sinnvoll. Zum einen läßt sich der korrigierte Verlauf des optischen Potentials $M(r,E)$ nur mehr sehr ungenau in einer WS-Form angeben, zum anderen kann man die phänomenologischen Parameter in einem gewissen Rahmen variieren, ohne die Güte der Wirkungsquerschnitt-Fits merklich zu verändern. Als Beispiel mögen die unterschiedlichen Werte von [BG69] und [MGM71] für den Imaginärteil dienen, s. Tabelle 6, obwohl beiden im wesentlichen dieselben experimentellen Streudaten zugrunde liegen; vgl. in diesem Zusammenhang auch [Ho71,Kap.8.]. Es ist bekannt, daß die differentiellen und totalen Wirkungsquerschnitte ziemlich insensitive bezüglich der speziellen Form des Potentials sind, solange nur die Volumenintegrale und rms- (root-mean-square-) Radien übereinstimmen [Ho84b]; dies gilt insbesondere für den Realteil, hat jedoch auch - in abgeschwächter Form - Gültigkeit für den Imaginärteil [Ho84b].

Man kann daher von einem Vergleich der phänomenologischen Volumenintegral- und rms-Radius-Werte mit den theoretischen eher eine verlässliche Aussage über die Güte der semiklassischen Korrekturen erwarten. Dies gilt nicht zuletzt aus einem weiteren Grund; beim Volumenintegral und dem rms-Radius handelt es sich um globale Größen, d.h. spezielle Schaleneffekte sind (zumindest teilweise) eingeegnet. Eine "Kernmaterie"-Rechnung, die ohnehin nur die "bulk"-Eigenschaften des Kerns beschreibt, gibt daher am ehe-

sten diese Größen exakt wieder (vgl. auch die entsprechenden Bemerkungen hierzu in der Einleitung).

Das Volumenintegral pro Nukleon J/A ist in folgender Weise definiert [Ho84b] (Realteil):

$$(J/A)(E) := - \frac{1}{A} \int d^3r v_{\text{opt}}^1(r, E) ; \quad (8.4)$$

für den rms-Radius $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ gilt:

$$\langle r^2 \rangle^{1/2} := \left[\frac{\int d^3r r^2 v_{\text{opt}}^1(r, E)}{\int d^3r v_{\text{opt}}^1(r, E)} \right]^{1/2} \quad (8.5)$$

(analog für den Imaginärteil).

In den Tabellen 7 und 8 sind für den Real- und den Imaginärteil die Werte von J/A und $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ bei der Energie $E = 30$ MeV eingetragen. Als Vergleich dienen dieselben experimentellen und theoretischen Arbeiten von [BG69, MGM71, JLM77b] wie schon in der vorangegangenen Diskussion der WS-Parameter.

Die Energieabhängigkeit ist den Abbn. 29 - 34 zu entnehmen, in denen Volumenintegrale und rms-Radien von Real- und Imaginärteil des optischen Potentials für die Nukleonenzahlen $A = 40, 120$ und 208 wiedergegeben sind. Die Ergebnisse für die LDA alleine sind gestrichelt, für die LDA mit den semiklassischen Korrekturen als durchgezogene Kurve eingetragen. Zum Vergleich sind zusätzlich die Ergebnisse von Mahaux et al. [JLM77b] für das Proton-optische Potential für die LDA und die "improved" LDA (strichpunktisiert) eingezeichnet. Die experimentellen Werte fallen entweder mit den "improved" LDA-Ergebnissen zusammen (dies betrifft die Volumenintegrale der Realteile) oder werden in der folgenden Diskussion gesondert erwähnt; sie sind ebenfalls [JLM77b] entnommen und basieren auf den Angaben von Perey und Perey [PP76].

Beim Realteil ist für das Volumenintegral (Abb. 29, unten und Tab. 7, Spalte 1) eine Differenz von etwa $30 - 40 \text{ MeVfm}^3$ zwischen dem LDA-Resultat und den phänomenologischen Werten festzustellen; sie läßt sich wieder auf die zu geringe Reichweite des Potentials zurückführen. Dieser Punkt ist bereits oben diskutiert worden. (z.B. würde die Vergrößerung des Reichweiteparameters um 0.3 fm bei ansonsten gleichbleibenden Potentialparametern den J/A -Wert auf 322 MeVfm^3 erhöhen.)

Die semiklassischen Korrekturen selbst bewirken nur eine geringfügige Änderung des LDA-Werts.

An der Kurve für die "improved" LDA-Ergebnisse in Abb. 29, die in etwa mit den experimentellen Werten zusammenfällt, erkennt man, daß der Hauptteil der Differenz ($\approx 130 \text{ MeVfm}^3$) zwischen den "vollen" phänomenologischen und den korrigierten LDA-Werten vom Symmetrie- und dem Coulombkorrekturterm herrührt.

Derselbe Effekt einer zu geringen Reichweite des Einteilchenpotentials ist auch beim rms-Radius festzustellen (Abb. 29, oben und Tab. 7, Spalte 2). Bemerkenswert ist der Umstand, daß die semiklassischen Korrekturen zur LDA den rms-Radius um etwa 0.2 fm vergrößern und damit genau die von der "improved" LDA auf phänomenologische Weise erzeugte Verbesserung der Resultate bewirken. Die experimentellen Werte sind relativ stark gestreut und liegen grob etwa 0.1 fm über der "improved" LDA-Kurve. Diesen Wert erreicht die vorliegende korrigierte LDA-Rechnung, wenn man die bereits diskutierten 0.3 fm hinzuaddiert, mit denen bei der Verwendung einer realistischen Wechselwirkung zu rechnen ist.

In die Tabelle 7 sind zusätzlich die Ergebnisse der LDA- und der FMIA- ("folded microscopic interaction"-) Rechnung von Brieva und Rook [BR77b] aufgenommen; die Autoren geben in ihrer Arbeit keine Werte für den isoskalaren Fall an. Ihre LDA-Resultate sind in Übereinstimmung mit

denen von Mahaux et al.. Für den rms-Radius erzielt die FMIA sogar eine Vergrößerung um fast 0.4 fm und liegt damit leicht über den experimentellen Werten.

In den Abbn. 31 und 33 sind die Resultate der Rechnung für die Nukleonenzahlen $A = 40$ und 120 wiedergegeben. Sowohl die Volumenintegral- als auch die rms-Radiuskurven besitzen qualitativ dasselbe Erscheinungsbild wie im Fall $A = 208$. Eine gesonderte Diskussion dieser Ergebnisse erübrigt sich daher.

Die Ergebnisse für den Imaginärteil sind in Tabelle 8 und Abb. 30 festgehalten. Zunächst ist zu bemerken, daß auch hier bei Verwendung einer besseren Wechselwirkung mit einer Erhöhung der Werte des Volumenintegrals und des rms-Radius zu rechnen ist. Es zeigt sich allerdings, daß die "LDA + Korrekturen"-Resultate bereits jetzt in etwa die richtigen Werte aufweisen (Tab. 8) und daher zu erwarten ist, daß sie in einer Rechnung mit einer realistischen Wechselwirkung zu hoch ausfallen; für das Volumenintegral wird dieser Effekt jedoch nicht sehr groß sein, und beim rms-Radius ist zum Erreichen des "vollen" Werts noch die Isevektorkomponente hinzuzufügen, welche für den Oberflächenparameter in den phänomenologischen Parametrisierungen relativ groß ist (0.15 - 0.20 fm) (s. Tab. 6), während der Wert $a_w = 0.52$ fm bei der "vollen" LDA-Rechnung von Mahaux [JLM77b] vermuten läßt, daß die Isevektorkomponente für a_w keinen grossen Einfluß besitzt. (Der Wert $a_w = 0.37$ fm in Tab. 6 ist fiktiv, da er sich aus der formalen Subtraktion des Isevektorbeitrags von [BG69] ergibt; er ist daher in Klammern gesetzt.) Da sich der Wert der Oberflächenkonstante direkt auf den rms-Radius auswirkt, ist für eine definitive Aussage auf eine "LDA + Korrekturen"-Rechnung zu warten, welche die Isevektorkomponente explizit miteinbezieht.

Als bemerkenswerte Wirkung der semiklassischen Korrekturen auf die reinen LDA-Resultate ist die Vergrößerung des rms-Radius um nahezu 0.5 fm und damit das Erreichen der experimentellen Werte festzuhalten. Brieva und Rook [BR77b] erzielen mit der FMIA ebenfalls eine Vergrößerung des rms-Radius von etwa 0.5 fm gegenüber ihren LDA-Resultaten.

Die Energieabhängigkeit der LDA- und "LDA + Korrekturen"-Volumenintegralwerte ist der Abb. 30, unten zu entnehmen. Zusätzlich ist wieder das "volle" "improved" LDA-Ergebnis von [JLM77b] eingetragen, das in etwa mit den experimentellen Werten übereinstimmt, die relativ stark streuen.

Es fällt das starke Abfallen der "vollen" Werte für niedrige Energien auf, das durch den schnell wachsenden Einfluß des Coulombkorrekturterms bedingt ist, der an sich offene inelastische Kanäle in zunehmendem Maße versperrt. Mahaux gibt z.B. für die Energien $E = 10$ und 30 MeV die Werte -60 MeVfm^3 und -30 MeVfm^3 für den Coulombkorrekturterm an. In einer "isoskalaren" Rechnung tritt dieser Effekt nicht auf.

Ein weiterer auffallender Unterschied ist der Umstand, daß die LDA- und "LDA + Korrekturen"-Werte mit wachsender Energie kleiner werden, während die "improved" LDA-Werte (und die experimentellen Werte) für höhere Energien konstant bleiben. Hier macht sich bereits das Fehlen höherer Partialwellen in der verwendeten Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung bemerkbar; der Hauptteil der relativ großen Differenz zu den experimentellen Werten ist jedoch durch die Nichtberücksichtigung der Coulombkorrektur- und Isovektorbeiträge bedingt.

Im oberen Teil der Abb. 30 ist noch einmal die deutliche Vergrößerung des rms-Radius durch die semiklassischen Korrekturen zu beobachten. Die experimentellen Werte liegen etwa $0.3 - 0.4$ fm über der "LDA + Korrekturen"-Kurve.

Auch beim Imaginärteil zeigen die Ergebnisse für die Nukleonenzahlen $A = 40$ und 120 (Abbn. 32 und 34) keine neuen Phänomene, so daß für sie das zum Fall $A = 208$ Gesagte gilt.

8.3. Zusammenfassung und Schlußbemerkungen

Auf der Grundlage der mikroskopischen Theorie des optischen Potentials im Rahmen der Greenfunktionstheorie wurde ein Formalismus entwickelt, der mit Hilfe der Phasenraumdarstellung eine semiklassische Entwicklung des Gleichungssystems der Leiternäherung erlaubt. Das Entwicklungsschema besitzt die folgenden Eigenschaften:

- Die nullte Ordnung der Entwicklung liefert die Formulierung des Kernmaterieproblems und damit den bisher in der Literatur üblichen Ausgangspunkt für die Behandlung des optischen Potentials, die Lokale-Dichte-Approximation (LDA).
- Die Terme höherer Ordnungen lassen sich in systematischer Weise gewinnen, und es ist im Prinzip eine selbstkonsistente Behandlung möglich.
- Die Umordnung des Iterationsschemas für die K-Matrix ermöglicht die Verwendung (semi-)phänomenologisch bestimmter, effektiver Kernmaterie-Wechselwirkungen.

Der Formalismus wurde zur Untersuchung der Vernachlässigungen benutzt, die bei der Berechnung des mikroskopischen optischen Potentials im Rahmen der LDA vorgenommen und bislang in der Literatur nur in phänomenologischer Weise korrigiert werden. Diese Korrekturen setzen sich aus Gradienten- und Krümmungstermen des effektiven Einteilchen-Kernpotentials und der Kern-dichte(matrix) sowie aus Energie- und Impulsableitungen der effektiven Kernmateriewechselwirkung ($K^{(0)}$ -Matrix) zusammen.

Unter Verwendung einer relativ einfachen freien Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung wurde eine numerische Berechnung der Korrekturen bis zur 2. Ordnung (- erste nichtverschwindende Ordnung) des Entwicklungsschemas vorge-

nommen. Es ergibt sich eine im wesentlichen befriedigende Behebung der Mängel der Lokalen-Dichte-Näherung; dies betrifft insbesondere die Beschreibung der rms-Radien des optischen Potentials. Somit erfährt auch die bislang phänomenologische Korrektur der einfachen LDA eine theoretische Begründung. Darüberhinaus lassen die numerischen Ergebnisse der vorliegenden Rechnung die Vermutung zu, daß höhere Korrekturordnungen keine nennenswerten Beiträge mehr liefern.

Die Untersuchung der einzelnen Korrekturterme ermöglicht einige weitere Schlüsse.

Die semiklassische Entwicklung des Einteilchenpropagators basiert sowohl auf Orts- und Impulsableitungen des Einteilchenpotentials als auch auf semiklassischen Korrekturtermen des Einteilchenpotentials. Es stellt sich heraus, daß diese letzteren "Rückkopplungs"-Terme von derselben Größenordnung sind wie die Ableitungsterme. Dies führt zu dem Schluß, daß in Theorien, die direkt die semiklassische Entwicklung des Einteilchenpropagators verwenden, wie etwa die Erweiterte-Thomas-Fermi-Theorie, die Korrekturen zum Einteilchenpotential nicht vernachlässigt werden können.

Bei der Behandlung der einzelnen Korrekturterme stellt sich heraus, daß die Modifikationen am optischen Potential, die sich aus den semiklassischen Korrekturen der $K^{(0)}$ -Matrix ergeben, bei weitem die kleinsten sind. Dies bedeutet, daß - im Vergleich zum Einteilchenpropagator und zur Integralstruktur der Faltungsgleichung - am ehesten die effektive Zweiteilchenwechselwirkung in Lokaler-Dichte-Näherung behandelt werden kann.

Diese Feststellung unterstützt die Vorgehensweise der "folded microscopic interaction"-Methode [GBR79], die nur die effektive Wechselwirkung in Lokaler-Dichte-Approximation (und mit einigen weiteren Näherungen), jedoch die Faltungsgleichung vollständig behandelt. Einschränkend muß allerdings

bemerkt werden, daß dieser Vorteil durch relativ umfangreiche Mittelungsprozeduren für die $K^{(0)}$ -Matrix erreicht wird, über deren Güte hier keine Aussage gemacht werden kann.

Da der Einteilchenpropagator nur in LDA-Näherung verwendet wird, läßt sich auch die Methode der "folded microscopic interaction" durch Einbeziehung der semiklassischen Korrekturen für den Einteilchenpropagator verbessern.

Die Differenz zwischen den numerischen Resultaten der vorliegenden Arbeit und den experimentellen Werten konnte im wesentlichen auf die einfache Struktur der benutzten Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung und die Nichtberücksichtigung des Coulomb- und des Isovektorbeitrags zurückgeführt werden. Es ist daher zu erwarten, daß bei Verwendung einer realistischen Wechselwirkung und der Einbeziehung der genannten Beiträge eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten erzielt wird. Wie Isovektor- und Coulombeffekte in eine Kernmaterierechnung einzubauen sind, wurde von Mahaux et al. [JLM77a] umfassend behandelt.

Für eine solche umfangreiche Rechnung wäre es jedoch wünschenswert, eine theoretisch voll befriedigende Methode zur Behandlung des Deuteronbindungspols der K-Matrix bei kleinen Dichten zu besitzen.

Anhänge

<u>Inhalt:</u>	<u>Seite</u>
A.1. Elastische Nukleonenstreuung am Grundzustand eines Atomkerns im Greenfunktionsformalismus	130
A.2. Der Korrelationsterm in den Brueckner- und den Λ -Theorien	133
A.3. Transformation der Faltungsgleichung in die Phasenraumdarstellung	138
A.4. Die Methode der "lokalen effektiven Kräfte"	140
A.5. Details der semiklassischen Entwicklung des Einteilchenpropagators	145
A.6. Umordnung des Iterationsschemas für die Leitergleichung	148
A.7. Beweis des Verschwindens der 1. Ordnung der Differentialoperatoren in der semiklassischen Entwicklung	150
A.8. Beweis des Verschwindens der 1. Ordnung der semiklassischen Entwicklung des effektiven Einteilchenpotentials in Hartree-Fock-Näherung	152
A.9. Die Behandlung höherer Potenzen der Einteilchengreenfunktion $(g^{(0)})^1$	154
A.10. Darstellung und Behandlung einiger häufig auftretender Distributionen	158

A.1. Elastische Nukleonenstreuung am Grundzustand eines

Atomkerns im Greenfunktionsformalismus

Es wird eine Beziehung zwischen der optischen Modellwellenfunktion $\phi_k^{(+)}$ und der Einteilchengreenfunktion hergeleitet und die Identität des verallgemeinerten optischen Potentials mit dem Massenoperator bewiesen [Vi67, We79].

Sei $|\psi_i^{(+)}\rangle$ der exakte Streuzustand für die Streuung eines Teilchens mit asymptotisch einlaufendem Impuls k_i an einem Target im Grundzustand $|0\rangle$.

Der asymptotische Anfangszustand sei $|\phi_i\rangle = a_{k_i}^+ |0\rangle$.

$|\psi_i^{(+)}\rangle$ und $|\phi_i\rangle$ sind durch den Møllerschen Wellenoperator $\Omega^{(+)}$ miteinander verknüpft [Ne66, S.157f]:

$$|\psi_i^{(+)}\rangle = \Omega^{(+)} |\phi_i\rangle, \quad (\text{A.1.1})$$

$$\Omega^{(+)} = \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{\frac{i}{\hbar} H t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}. \quad (\text{A.1.2})$$

H ist der volle Hamiltonoperator des Systems, während H_0 den Hamiltonoperator von Projektil und Target bei "abgeschalteter" Wechselwirkung repräsentiert.

$\Omega^{(+)}$ läßt sich in folgender Form darstellen [Ne66]:

$$\Omega^{(+)} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 dt e^{-\eta t} e^{\frac{i}{\hbar} H t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}. \quad (\text{A.1.3})$$

Dies führt für $|\psi_i^{(+)}\rangle$ auf:

$$\begin{aligned} |\psi_i^{(+)}\rangle &= |k_i^{(+)}, 0\rangle = \\ &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 dt e^{-\eta t} e^{\frac{i}{\hbar} H t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} a_{k_i}^+ |0\rangle = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 \eta dt e^{\eta t} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + E_{k_i})t} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} a_{k_i}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} |0\rangle = \\
 &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 \eta dt e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{k_i} + i\eta)t} a_{k_i}^\dagger(t) |0\rangle \quad (A.1.4)
 \end{aligned}$$

oder:

$$\begin{aligned}
 |\psi_i^{(+)}\rangle &\doteq \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 \eta dt e^{-\frac{i}{\hbar}[E_0 + E_{k_i} - H + i\eta]t} a_{k_i}^\dagger |0\rangle \\
 &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \eta \frac{1}{E_{k_i} + E_0 - H + i\eta} a_{k_i}^\dagger |0\rangle \quad (A.1.5)
 \end{aligned}$$

Die optische Modell-Wellenfunktion $\phi_{k(+)}(r)$ ist definiert [Br67, We69] als Projektion des vollständigen Streuzustand auf denjenigen Zustand $a_r^\dagger |0\rangle$, der aus dem Grundzustand $|0\rangle$ des Targets und einem Teilchen mit den Quantenzahlen $r = (\vec{r}, \sigma, \tau)$ (Ort, Spin, Isospin) besteht:

$$\phi_{k(+)}(r) = \langle 0 | a_r | \psi_i^{(+)} \rangle = \langle 0 | a_r | k_i^{(+)} \rangle \quad (A.1.6)$$

Einsetzen von (A.1.5) in (A.1.6) liefert:

$$\phi_{k(+)}(r) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} i\eta \langle 0 | a_r \frac{1}{E_k + E_0 - H + i\eta} a_k^\dagger | 0 \rangle \quad (A.1.7)$$

Vergleicht man (A.1.7) mit der Spektraldarstellung der Zweipunktfunktion $g_{12}(\epsilon)$ (Kapitel 3.2.):

$$g_{12}(\epsilon) = \langle 0 | a_1 \frac{1}{\epsilon - H + E_0 + i\eta} a_2^\dagger + a_2^\dagger \frac{1}{\epsilon + H - E_0 - i\eta} a_1 | 0 \rangle \quad (A.1.8)$$

so erhält man

$$\phi_{k(+)}(r) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} i\eta g_{rk}(\epsilon = E_k) \quad (A.1.9)$$

Der Lochanteil von $g(\epsilon)$ verschwindet, da für die Energie $\epsilon = E_k > 0$ der Pol im zweiten Term von (A.1.8) ohne Bedeutung bleibt. E_k ist die Einschußenergie des Projektils, also $E_k = k^2/2m$.

Damit ist der im zweiten Abschnitt behauptete Zusammenhang (2.21) hergestellt.

Nach Gleichung (2.22) genügt die Zweipunktfunktion der Dysongleichung. Führt man den Grenzübergang aus (A.1.9) durch und wählt für die Energie ϵ die Einschußenergie E_k , so erhält man die Schrödingergleichung (2.20) für die optische Modell-Wellenfunktion:

$$-\hbar^2 \frac{\nabla^2}{2m} \phi_{k(+)}(r) + \int d^3 r' M(r, r'; E_k) \phi_{k(+)}(r') = E_k \phi_{k(+)}(r) \quad (A.1.10)$$

Der Massenoperator spielt die Rolle des effektiven Einteilchenpotentials. Das optische Modell-Potential ist daher mit dem "on-energy-shell"-Wert des Massenoperators zu identifizieren.

Im allgemeinen ist für dieses "verallgemeinerte" optische Potential vor einem Vergleich mit phänomenologischen optischen Modell-Daten noch eine Energiemittelung vorzunehmen (für Details siehe z.B. [MBB85]). Dies entfällt bei einer Kernmaterierechnung (wie sie in der vorliegenden Arbeit durchgeführt wird), da diese bereits die entsprechenden stetigen ("glatten") Funktionen bzgl. der Energieabhängigkeit liefert.

A.2. Der Korrelationsterm in den Brueckner- und den Λ -Theorien

Es wird bewiesen, daß das Verschwinden des Korrelationsbeitrags zum Imaginärteil des Massenoperators für Energien $\epsilon > \epsilon_F$ (ϵ_F : Fermienergie) [Ma81] in der Brueckner-Theorie nicht durch die spezielle (eingeschränkte) Form des Bruecknerpropagators (vgl. Kap. 3.3.) entsteht, sondern auch für die allgemeineren, nicht-störungstheoretisch hergeleiteten Λ -Approximationen gilt, vgl. [We85].

In der Störungstheorie versteht man unter dem "Korrelationsbeitrag" bzw. dem "Korrelationsgraph" einen 2-Loch-Linien-Beitrag, der die Streuung des Projektilnukleons an einem "angeregten" Targetnukleon beschreibt; auf diese Weise werden Grundzustandskorrelationen berücksichtigt [Ma81].

Ausgangspunkt der Betrachtung sind die Gleichungen (4.20) der Leiternäherung in der allgemeinen Impulsdarstellung, wobei zunächst (für die Gleichungen (A.2.1-7)) nicht auf Schwerpunkts- und Relativkoordinaten transformiert werden soll. Es wird Kernmaterie untersucht; Spin-/Isospin-Indices sind unterdrückt.

In der Quasiteilchen-Approximation (s. Kapitel 3.2.) lautet der Zweiteilchenpropagator:

$$\begin{aligned} \tilde{\Lambda}(\vec{p}, \vec{q}, \vec{p}', \vec{q}'; z) &= \delta(\vec{p} - \vec{p}') \delta(\vec{q} - \vec{q}') \tilde{\Lambda}(\vec{p}, \vec{q}; z) = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \delta(\vec{q} - \vec{q}') \times \\ &\quad (A.2.1) \\ &\quad \frac{\theta(E(\vec{p}) - \epsilon_F) \theta(E(\vec{q}) - \epsilon_F) n_{\vec{p}}(\vec{p}) n_{\vec{q}}(\vec{q}) - \theta(\epsilon_F - E(\vec{p})) \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})) n_{\vec{q}}(\vec{q}) n_{\vec{p}}(\vec{p})}{z - E(\vec{p}) - E(\vec{q})}; \end{aligned}$$

der Massenoperator läßt sich in folgender Form schreiben, vgl. (3.35):

$$\tilde{M}(\vec{p}, \vec{p}'; z) = \int d^3 q \, \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})) \tilde{K}(\vec{p}, \vec{q}, \vec{p}', \vec{q}; z + E(\vec{q})) n_{\vec{q}}(\vec{q}) -$$

$$\int \frac{d\epsilon'}{2\pi i} \int d^3 q \, \theta(2\epsilon_F - \epsilon') [\tilde{K}(\vec{p}, \vec{q}, \vec{p}', \vec{q}; \epsilon' + i\eta) - \tilde{K}(\vec{p}, \vec{q}, \vec{p}', \vec{q}; \epsilon' - i\eta)] \times$$

$$\frac{\theta(E(\vec{q}) - \epsilon_F) n_>(\vec{q}) + (\epsilon_F - E(\vec{q})) n_<(\vec{q})}{\epsilon' - z - E(\vec{q})}, \quad (\text{A.2.2})$$

mit

$$E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \text{Re } M(\vec{p}; E(\vec{p})), \quad (\text{A.2.3})$$

$$n_>(\vec{p}) = 1 - n(\vec{p}); \quad n_<(\vec{p}) = n(\vec{p}), \quad (\text{A.2.4})$$

$$\tilde{n}^{-1}(\vec{p}) = 1 - \frac{\partial}{\partial \epsilon} \text{Re } M(\vec{p}; \epsilon) \Big|_{\epsilon=E(\vec{p})}, \quad n(\vec{p}) = \begin{cases} \tilde{n}(\vec{p}) & p < p_F \\ 1 - \tilde{n}(\vec{p}) & p > p_F \end{cases}, \quad (\text{A.2.5})$$

$$\tilde{M}(\vec{p}, \vec{p}'; z) = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \tilde{M}(\vec{p}; z). \quad (\text{A.2.6})$$

Mit Hilfe der Identität

$$\tilde{K}(\vec{p}, \vec{q}, \vec{p}', \vec{q}; \epsilon + i\eta) - \tilde{K}(\vec{p}, \vec{q}, \vec{p}', \vec{q}; \epsilon - i\eta) =$$

$$\frac{1}{2} \int d^3 p'' d^3 q'' \tilde{K}(\vec{p}, \vec{q}, \vec{p}'', \vec{q}''; \epsilon - i\eta) [\tilde{\Lambda}(\vec{p}'', \vec{q}''; \epsilon + i\eta) - \tilde{\Lambda}(\vec{p}'', \vec{q}''; \epsilon - i\eta)] \times$$

$$\tilde{K}(\vec{p}'', \vec{q}'', \vec{p}', \vec{q}; \epsilon + i\eta) \quad (\text{A.2.7})$$

läßt sich $\tilde{M}(z)$ umformen (jetzt in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten):

$$\tilde{M}(\vec{p}; z) = \int d^3 q \, \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})) n_<(\vec{q}) \tilde{K}(\vec{Q}; \vec{k}, \vec{k}; z + E(\vec{q})) +$$

$$\frac{1}{2} \iiint d^3 q d^3 q' d^3 p' [\delta(\vec{Q} - \vec{Q}') |\tilde{K}(\vec{Q}; \vec{k}, \vec{k}'; E(\vec{p}') + E(\vec{q}') + i\eta)|^2] \times$$

$$\theta(\epsilon_F - E(\vec{p}')) \theta(\epsilon_F - E(\vec{q}')) n_<(\vec{p}') n_<(\vec{q}') \times$$

$$\frac{\theta(E(\vec{q}) - \epsilon_F) n_>(\vec{q}) + \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})) n_<(\vec{q})}{z + E(\vec{q}) + E(\vec{q}') + E(\vec{p}')} , \quad (\text{A.2.8})$$

mit

$$\vec{Q} = \vec{p} + \vec{q}, \quad \vec{Q}' = \vec{p}' + \vec{q}', \quad \vec{k} = \frac{1}{2}(\vec{p} - \vec{q}), \quad \vec{k}' = \frac{1}{2}(\vec{p}' - \vec{q}').$$

An Gleichung (A.2.8) ist der Unterschied zwischen den Λ -Theorien und der Bruecknertheorie festzustellen:

Bei Verwendung eines Bruecknerpropagators

$$\bar{\Lambda}^{\text{Br}}(\vec{p}, \vec{q}; z) = \frac{\theta(E(\vec{p}) - \epsilon_F) \theta(E(\vec{q}) - \epsilon_F) n_{>}(\vec{p}) n_{>}(\vec{q})}{z - E(\vec{p}) - E(\vec{q})} \quad (\text{A.2.9})$$

sind die Besetzungszahlfunktionen $n_{<}(\vec{p}) \times n_{<}(\vec{q})$ im zweiten Summanden von (A.2.8) Null, und dieser Term verschwindet vollständig; es gilt dann:

$$M^{\text{Br}}(\vec{p}; \epsilon) = \int d^3q \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})) n_{<}(\vec{q}) K^{\text{Br}}(\vec{Q}; \vec{k}, \vec{k}; E(\vec{q}) + \epsilon + i\eta). \quad (\text{A.2.10})$$

Der Korrelationsgraph (und andere "Mehr-Loch-Linien"-Beiträge) werden in der Bruecknertheorie durch die störungstheoretische Entwicklung des zweiten Summanden in (A.2.8) gewonnen [Ma81].

Für den Imaginärteil von $M(\vec{p}; \epsilon)$:

$$\text{Im } M(\vec{p}; \epsilon) = \frac{1}{2i} [M(\vec{p}; \epsilon + i\eta) - \bar{M}(\vec{p}; \epsilon - i\eta)] [\theta(\epsilon - \epsilon_F) - \theta(\epsilon_F - \epsilon)] \quad (\text{A.2.11})$$

gilt [We85]:

$$\begin{aligned} [\theta(\epsilon - \epsilon_F) - \theta(\epsilon_F - \epsilon)] \text{Im } M(\vec{p}; \epsilon) = & -\frac{n}{2} \int d^3q \int d^3q' d^3p' [\delta(\vec{Q} - \vec{Q}') \\ & |\tilde{K}(\vec{Q}; \vec{k}, \vec{k}'; E(\vec{p}') + E(\vec{q}') + i\eta)|^2] \delta(\epsilon + E(\vec{q}) - E(\vec{q}') - E(\vec{p}')) \times \\ & [\theta(E(\vec{p}') - \epsilon_F) \theta(E(\vec{q}') - \epsilon_F) \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})) n_{>}(\vec{q}') n_{>}(\vec{p}') n_{<}(\vec{q}) + \\ & \theta(\epsilon_F - E(\vec{p}')) \theta(\epsilon_F - E(\vec{q}')) \theta(E(\vec{q}) - \epsilon_F) n_{<}(\vec{q}') n_{<}(\vec{p}') n_{>}(\vec{q})] \}. \quad (\text{A.2.12}) \end{aligned}$$

Der erste Summand in der zweiten eckigen Klammer repräsentiert den Polarisations-Beitrag - der Name stammt aus der Störungstheorie und bezeich-

net den in der BHF-Approximation üblicherweise berücksichtigten Graphen - und der zweite Term den Korrelationsbeitrag.

Die δ -Funktion in (A.2.12) bewirkt im Verein mit den θ -Funktionen innerhalb der eckigen Klammer, daß für Energien $\epsilon > \epsilon_F$ der Korrelationsbeitrag und für Energien $\epsilon < \epsilon_F$ der Polarisationsbeitrag verschwindet. Das Beweisziel ist damit erreicht; es ist gezeigt, daß die Beschränkung im Zweiteilchenpropagator auf die Bruecknerform (wie sie in dieser Arbeit vorgenommen wird) beim Imaginärteil des optischen Potentials keine weitere Vernachlässigung gegenüber den A-Theorien nach sich zieht.

Ein anderer Fall liegt beim Realteil

$$\operatorname{Re} M(\vec{p}; \epsilon) = \frac{1}{2} [\tilde{M}(\vec{p}; \epsilon + i\eta) + \tilde{M}(\vec{p}; \epsilon - i\eta)] \quad (\text{A.2.13})$$

vor; es gilt (" $\mathcal{P}$ " repräsentiert ein Hauptwertintegral) [We85]:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} M(\vec{p}; \epsilon) = & \frac{1}{2} \int d^3q \, \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})) [\tilde{K}(\vec{Q}; \vec{k}, \vec{k}; \epsilon + E(\vec{q}) + i\eta) + \\ & \tilde{K}(\vec{Q}; \vec{k}, \vec{k}; \epsilon + E(\vec{q}) - i\eta)] n_{<}(\vec{q}) + \iiint d^3q d^3q' d^3p' [\delta(\vec{Q} - \vec{Q}') \times \\ & |\tilde{K}(\vec{Q}; \vec{k}, \vec{k}'; E(\vec{p}') + E(\vec{q}') + i\eta)|^2] \frac{\mathcal{P}}{\epsilon + E(\vec{q}) - E(\vec{q}') - E(\vec{p}')} \{ \theta(\epsilon_F - E(\vec{p}')) \times \\ & \theta(\epsilon_F - E(\vec{q}')) \theta(E(\vec{q}) - \epsilon_F) n_{<}(\vec{p}') n_{<}(\vec{q}') n_{>}(\vec{q}) + \theta(\epsilon_F - E(\vec{p}')) \times \\ & \theta(\epsilon_F - E(\vec{q}')) \theta(\epsilon_F - E(\vec{q})) n_{<}(\vec{p}') n_{<}(\vec{q}') n_{<}(\vec{q}) \} \quad (\text{A.2.14}) \end{aligned}$$

Der erste Summand beinhaltet die Hartree-Fock- und die Polarisationssterme (und damit die üblichen BHF-Beiträge). Der erste Term des zweiten Summanden entspricht dem Korrelationsterm; er liefert in allen Energiebereichen einen nichtverschwindenden Beitrag. Der zweite Term des zweiten Summanden erweist sich als spurios, da er durch einen gleichartigen Term mit entgegengesetztem Vorzeichen aus dem ersten Summanden kompensiert

wird. Von diesem Sachverhalt kann man sich am einfachsten durch Einsetzen der störungstheoretischen Entwicklung der K-Matrix:

$$K = 2(\bar{v} + \bar{v}\Lambda\bar{v} + \bar{v}\Lambda\bar{v}\Lambda\bar{v} + \dots) \quad (\text{A.2.15})$$

in die beiden Terme überzeugen.

A.3. Transformation der Faltungsgleichung in die Phasenraumdarstellung

Zur Demonstration der Techniken, die für die Transformation der Gleichungen der Leiternäherung von der Impulsdarstellung in die Phasenraumdarstellung benutzt werden, wird dieser Übergang für die Faltungsgleichung explizit durchgeführt.

Die Impulsdarstellung lautet (s. (4.20c)):

$$M(\vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\eta\epsilon'} \iint d^3q d^3q' \times \\ K(\vec{p} + \vec{q}, \vec{p} + \vec{q}'; \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}' - \vec{q}'}{2}; \epsilon + \epsilon') g(\vec{q}', \vec{q}; \epsilon') . \quad (A.3.1)$$

Für K, M und g werden in (A.3.1) die Wignertransformierten eingesetzt; dies führt auf:

$$(2\pi\hbar)^{-3} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p} - \vec{p}')\vec{r}} M(\vec{r}, \frac{\vec{p} + \vec{p}'}{2}; \epsilon) = \\ -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\eta\epsilon'} \iint d^3q d^3q' [(2\pi\hbar)^{-3} \int d^3R e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p} + \vec{q} - \vec{p}' - \vec{q}')\vec{R}} \times \\ K(\vec{R}, \frac{\vec{p} + \vec{q} + \vec{p}' + \vec{q}'}{2}, \frac{\vec{p} - \vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}' - \vec{q}'}{2}; \epsilon + \epsilon')] \times [(2\pi\hbar)^{-3} \int d^3p e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{q}' - \vec{q})\vec{p}} \times \\ g(\vec{p}, \frac{\vec{q} + \vec{q}'}{2}; \epsilon')] . \quad (A.3.2)$$

Die Variablentransformationen

$$\vec{K} = \frac{\vec{p} + \vec{p}'}{2}, \quad \vec{k} = \vec{p} - \vec{p}'; \quad \vec{P} = \frac{\vec{q} + \vec{q}'}{2}, \quad \vec{p} = \vec{q} - \vec{q}' \quad (A.3.3)$$

und eine beidseitige Fouriertransformation bezüglich $\vec{k}$ liefern:

$$M(\vec{s}, \vec{K}; \epsilon) = -i \int \frac{d\epsilon'}{2\pi\hbar} e^{i\eta\epsilon'} \int d^3k e^{\frac{i}{\hbar}\vec{s}\vec{k}} \iint d^3p d^3P (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3R e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{k} + \vec{p})\vec{R}} \times \\ K(\vec{R}, \vec{k} + \vec{P}; \frac{\vec{k} - \vec{P}}{2} + \frac{\vec{k} - \vec{P}}{4}, \frac{\vec{k} - \vec{P}}{2} - \frac{\vec{k} - \vec{P}}{4}; \epsilon + \epsilon') (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{P}} g(\vec{p}, \vec{P}; \epsilon') . \quad (A.3.4)$$

Mit Hilfe des Verschiebungsoperators $e^{\vec{s} \cdot \vec{y}}$:

$$f(\vec{x} + \vec{s}) = e^{\vec{s} \cdot \vec{y}} f(\vec{y}) \Big|_{\vec{y}=\vec{x}} \quad (\text{A.3.5})$$

lassen sich K und g aus (A.3.4) in folgender Weise formulieren:

$$K(\vec{R}, \vec{K} + \vec{P}; \frac{\vec{K} - \vec{P}}{2} + \frac{\vec{k} - \vec{p}}{4}, \frac{\vec{K} - \vec{P}}{2} - \frac{\vec{k} - \vec{p}}{4}; \epsilon + \epsilon') =$$

$$e^{(\vec{R} - \vec{s}) \cdot \vec{v}_{s''}} e^{\frac{\vec{K} - \vec{P}}{4} \cdot \vec{v}_{\kappa'}} e^{-\frac{\vec{k} - \vec{p}}{4} \cdot \vec{v}_{\kappa''}} x$$

$$K(\vec{s}'', \vec{K} + \vec{P}; \vec{\kappa}', \vec{\kappa}''; \epsilon + \epsilon') \Big|_{\vec{\kappa}' = \vec{\kappa}'' = \frac{\vec{k} - \vec{p}}{2}; \vec{s}'' = \vec{s}} \quad (\text{A.3.6})$$

$$g(\vec{\rho}, \vec{P}; \epsilon') = e^{(\vec{\rho} - \vec{s}) \cdot \vec{v}_{s'}} g(\vec{s}', \vec{P}; \epsilon') \Big|_{\vec{s}' = \vec{s}} \quad (\text{A.3.7})$$

Einsetzen von (A.3.6,7) in (A.3.4) ermöglicht die explizite Durchführung aller Integrationen bis auf diejenige über die Variable $\vec{P}$, und man gelangt zur Formulierung der Faltungsgleichung in der Phasenraumdarstellung, Gleichung (4.21c).

A.4. Die Methode der "lokalen effektiven Kräfte"

An einem einfachen Beispiel wird gezeigt, wie die semiklassische Entwicklung des mikroskopischen optischen Potentials in der Methode der "lokalen effektiven Kräfte" (oder auch "folded microscopic interactions") [BR77a, BR77b, Br79, GBR79] Anwendung findet [BWW84].

Zu diesem Zweck werden zunächst die in dieser Theorie vorgenommenen Mittelungsprozeduren für die K-Matrix kurz skizziert.

Ausgehend von einer lokalen Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung v ersetzt man die $K^{(0)}$ -Matrix durch eine lokale Parametrisierung ϑ [Br79]:

$$K_{LL'}^{(0), JST}(\vec{R}, \vec{p}; r, r'; \epsilon) \longrightarrow \frac{\delta(r-r')}{rr'} \vartheta_{LL'}^{JST}(r; \vec{R}, \vec{p}; \epsilon), \quad (A.4.1)$$

(bzgl. der Drehimpulsentwicklung wird auf Abschnitt 6. verwiesen).

Des weiteren legt die Struktur der Gl.(4.22c) eine Mittelung über die Fermiverteilung nahe:

$$K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p} + \vec{q}; \epsilon + E(\vec{R}, \vec{q})) \longrightarrow K^{(0)}(\vec{R}, \vec{p}; \epsilon) \longrightarrow \tilde{v}(\vec{R}, \vec{p}; \epsilon), \quad (A.4.2)$$

(das gemittelte ϑ wird mit $\tilde{v}$ bezeichnet; eine Verwechslung mit den durch "˜" gekennzeichneten analytischen Fortsetzungen der Funktionen in Kapitel 3.2. ist nicht zu befürchten).

Durch diese Vorgehensweise eliminiert man die q -Abhängigkeit der K-Matrix im Ausdruck für den Massenoperator, vgl. (4.22c).

Die entsprechende lokale effektive Kraft $\tilde{v}$ ergibt sich damit aus [BR77b, GBR79]:

$$\begin{aligned} \tilde{v}_{LL'}^{JST}(r; \vec{R}, \vec{p}; \epsilon) &= \left\{ \int d^3 q' \, \theta(p_F - q') \sum_{L''} j_{L''}(qr/M) \, v_{LL''}^{JST}(r) \times \right. \\ &\quad \left. n_{LL'}^{JST}(\vec{R}, \vec{Q}; r; \epsilon + E(\vec{R}, \vec{Q})) \right\} \times \left\{ \int d^3 q' \, \theta(p_F - q') \, j_L(qr/M) \times \right. \\ &\quad \left. j_{L'}(qr/M) \right\}^{-1}, \quad (A.4.3) \end{aligned}$$

mit

$$\vec{q} = \frac{\vec{p}-\vec{q}'}{2}, \quad \vec{Q} = \vec{p}+\vec{q}' \quad (\text{A.4.4})$$

Ω bezeichnet den Møllerschen Wellenoperator, welcher der Zweiteilchen-Wellenfunktion in Kernmaterie entspricht.

Wegen der komplizierten J- und L-Abhängigkeit ist es üblich, zusätzlich eine J- und L-Mittelung durchzuführen, die schließlich auf folgende Form für $\tilde{v}$ führt [Br79, GBR79] (nur die Ortskoordinate ist explizit angegeben):

$$\tilde{v}(r) = \sum_{ST} P_S P_T \tilde{v}^{ST}(r) + \sum_T P_T \tilde{v}_{LS}^T(r) (\vec{L} \cdot \vec{S}) + \sum_T P_T \tilde{v}(r) S_{12}. \quad (\text{A.4.5})$$

P_T und P_S repräsentieren die Spin- und Isospin-Projektoren, S_{12} bezeichnet den Tensoroperator.

Um das Beispiel möglichst übersichtlich zu halten, soll die weitere Darstellung auf den ersten Term von (A.4.5) beschränkt bleiben (die anderen Beiträge können in analoger Weise behandelt werden). Darüberhinaus wird das effektive Einteilchenpotential der Einfachheit halber als lokal angenommen, $V = V(R)$ (d.h. die Impulsabhängigkeit wird vernachlässigt).

Entwickelt man Gl.(4.22a) bis zur 2. Ordnung, so erhält man mit (A.4.1 und 5) für die auf der effektiven lokalen Kraft $\tilde{v}$ aufbauende K-Matrix:

$$\begin{aligned} K(\vec{R}, \vec{p}; \vec{r}, \vec{r}'; \epsilon) &= \sum_{ST} P_T P_S \left\{ \tilde{v}^{ST}(r) [\delta(\vec{r}-\vec{r}') - (-)^{S+T} \delta(\vec{r}+\vec{r}')] + \tilde{v}^{ST}(r) \times \right. \\ &\quad \left. [(W(R, P; \epsilon; |\vec{r}-\vec{r}'|) (\vec{r}+\vec{r}')^2 - (-)^{S+T} W(R, P; \epsilon; |\vec{r}+\vec{r}'|) (\vec{r}-\vec{r}')^2) \times \right. \\ &\quad \left. \frac{-1}{24} (\Delta_R V(R)) + \frac{\hbar^2}{16m} (W(R, P; \epsilon; |\vec{r}-\vec{r}'|) - (-)^{S+T} W(R, P; \epsilon; |\vec{r}+\vec{r}'|)) \times \right. \\ &\quad \left. [(\frac{dp_F(R)}{dR})^2 \frac{d^2}{dp_F^2} + (\Delta_R p_F(R)) \frac{d}{dp_F}] + \frac{1}{12} \hbar^2 (\Delta_R V(R)) (W(R, P; \epsilon; |\vec{r}-\vec{r}'|) - \right. \\ &\quad \left. (-)^{S+T} W(R, P; \epsilon; |\vec{r}+\vec{r}'|)) \Delta_P \right] \tilde{v}^{ST}(r') \}, \quad (\text{A.4.6}) \end{aligned}$$

$$W(R, P; \epsilon; r) := \frac{\partial}{\partial \epsilon} (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3q e^{\frac{i}{\hbar} q \cdot r} \frac{N(P, q, p_F(R))}{\epsilon - \frac{p^2}{4m} - \frac{q^2}{m} - 2V(R) + i\eta} \quad (A.4.7)$$

Um einen direkten Vergleich mit dem von v. Geramb, Brieva und Rook [GBR79] angegebenen Ausdruck zu ermöglichen, wird das Proton-optische Potential berechnet. Die lokal-äquivalente, energieabhängige Form lautet in der lokalen Impulsnäherung [GBR79, PS64]:

$$\begin{aligned} U(\vec{r}, E) &= \int d^3s M(\vec{r}, \vec{r}+\vec{s}; E) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{s} \cdot \vec{r}} \\ &= (2\pi\hbar)^{-3} \iint d^3s d^3p M_{loc}(\vec{r}+\frac{\vec{s}}{2}, \vec{p}; E) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{s} \cdot (\vec{p}' - \vec{p})} \Big|_{|\vec{p}'| = p(r)} \quad (A.4.8) \end{aligned}$$

mit dem lokalen Impuls:

$$\begin{aligned} p(r) &= [2m(E - \text{Re } U(r, E) - V_{Coul}(r))]^{1/2} \\ &= [2m(\tilde{E} - \text{Re } U(r, E))]^{1/2}. \quad (A.4.9) \end{aligned}$$

Die lokale Impulsnäherung M_{loc} in (A.4.8) ist so zu verstehen, daß in der eckigen Klammer des Ausdrucks (4.22c) für den Massenoperator $|\vec{p}|$ durch $p(r)$ zu ersetzen ist.

Für das Proton-optische Potential erhält man dann aus (4.22c) und (A.4.6 und 8):

$$\begin{aligned} U_p(\vec{r}, E) &= \sum_{\alpha=p, n} \sum_{ST} C_{\alpha}^{ST} \left[\iint d^3x d^3s (j_0(p_F(r)x/\hbar) \tilde{v}^{ST}(|\vec{x}-\vec{s}|, |\vec{r}-\frac{1}{2}(\vec{x}-\vec{s})|; \tilde{E}) \times \right. \\ &\quad \rho_{\alpha}(\vec{r}+\vec{s}, \vec{r}+\vec{s}-\vec{x}) [(\delta(\vec{x}) - (-)^{S+T} \delta(\vec{s})) + (A(s, x, p(r), r-\frac{1}{2}(\vec{x}-\vec{s}), \tilde{E}) - \\ &\quad \left. (-)^{S+T} A(x, s, p(r), r-\frac{1}{2}(\vec{x}-\vec{s}), \tilde{E})) \times \right. \\ &\quad \left. \tilde{v}^{ST}(|\vec{s}+\vec{x}|, |\vec{r}-\frac{1}{2}(\vec{x}-\vec{s})|; \tilde{E})] \right] \quad (A.4.10) \end{aligned}$$

mit den Definitionen:

$$C_{\alpha}^{ST} = \frac{1}{4} \delta_{SO} \delta_{TO} \delta_{\alpha n} + \delta_{SO} \delta_{T1} \left(\frac{1}{4} \delta_{\alpha n} + \frac{1}{2} \delta_{\alpha p} \right) + \frac{3}{4} \delta_{S1} \delta_{TO} \delta_{\alpha n} + \delta_{S1} \delta_{T1} \left(\frac{3}{4} \delta_{\alpha n} + \frac{3}{2} \delta_{\alpha p} \right), \quad (A.4.11)$$

$$A(s, x, p(r), y, E) = 8 W(y, p(r); E; |2\vec{x}|) \left\{ \frac{1}{6} s^2 (\Delta_y V(y)) + \frac{1}{16m} \mathcal{H}^2 \left[\left(\frac{dp_F(y)}{dy} \right)^2 \frac{d^2}{dp_F^2(y)} + (\Delta_y p_F(y)) \frac{d}{dp_F(y)} \right] + \frac{1}{12} \mathcal{H}^2 (\Delta_y V(y)) \times \left[\frac{3}{m} \frac{d}{dE} + \frac{2}{m} \frac{d^2}{dE^2} \right] \right\}. \quad (A.4.12)$$

Die Dichtematrix $\rho_{\lambda}(\vec{r}, \vec{r}')$ gewinnt man aus der energieintegrierten und bis zur 2. Ordnung entwickelten Einteilchengreenfunktion, vgl. Kapitel 4.2.3. und Anhang A.5.. Mit den hier gemachten Einschränkungen gilt:

$$\begin{aligned} \rho_{\lambda}(\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}, \vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}) &= (2\pi\mathcal{H})^{-3} \int d^3q \, e^{i\vec{r}\vec{q}} (2\pi i\mathcal{H})^{-1} \int d\epsilon \, e^{i\eta\epsilon} g_{\lambda}(\vec{R}, \vec{q}; \epsilon) \\ &= \frac{3}{x_{\lambda}} j_1(x_{\lambda}) \rho_{\lambda}^0(R) + \mathcal{H}^2 (4\pi/(2\pi\mathcal{H})^3) \left\{ \frac{m}{72} p_{F,\lambda}^{-1}(R) (\Delta_R V_{\lambda}(R)) \times \right. \\ &\quad \left. (x_{\lambda}^2 y_1(x_{\lambda}) + 5x_{\lambda} y_0(x_{\lambda})) + \frac{m^2}{24} p_{F,\lambda}^{-3}(R) (v_R V_{\lambda}(R))^2 x_{\lambda}^2 y_1(x_{\lambda}) - \right. \\ &\quad \left. m p_{F,\lambda}(R) \mathcal{H}^{(2)-HF}(\vec{R}, p_{F,\lambda}(R)) j_0(x_{\lambda}) \right\}. \quad (A.4.13) \end{aligned}$$

j_1 bzw. y_1 bezeichnen sphärische Besselfunktionen der 1. bzw. 2. Art [AS65]; für die Dichte in Thomas-Fermi-Näherung gilt:

$$\begin{aligned} \rho_{\lambda}^0(R) &= \rho_{t,m_s}^0(R) = \frac{1}{2} \frac{1}{3\pi^2 \mathcal{H}^3} p_{F,\lambda}^3(R) \\ &\approx \frac{\rho_{tot}(R)}{2A} \times \left[\begin{array}{l} Z \\ N \end{array} \begin{array}{l} \text{für Protonen} \\ \text{für Neutronen} \end{array} \right], \quad (A.4.14) \end{aligned}$$

und x_{λ} ist durch

$$x_{\lambda} = x_{\lambda}(r, p_{F,\lambda}(R)) = r p_{F,\lambda}(R) / M \quad (A.4.15)$$

definiert.

Der erste Term des Ausdrucks (A.4.10) für das optische Potential ist identisch mit der von [GBR79, Gl.(38)] angegebenen Form. Der zweite Term beinhaltet die Korrekturen zur LDA-Version der Methode der "lokalen effektiven Kräfte", die durch die semiklassische Entwicklung der Dichtematrix und der effektiven Zweiteilchenwechselwirkung erzeugt werden.

Die Faltungsgleichung wurde keiner semiklassischen Entwicklung unterzogen, sondern vollständig in der Form (4.22c) benutzt; dies war aufgrund des lokalen Charakters der effektiven Kraft $\tilde{v}$ möglich, vgl. (A.4.8 und 10).

A.5. Details der semiklassischen Entwicklung des Einteilchenpropagators

Die semiklassische Entwicklung der Dysongleichung bis zur 2. Ordnung nach der Methode von Grammaticos und Voros [GV79] liefert (vgl. Kapitel 4.2.3., Gln.(4.29)):

$$g^{(0)} = \frac{1}{H^{(0)}} , \quad (A.5.1a)$$

$$g^{(1)} = \frac{M^{(1)}}{(H^{(0)})^2} , \quad (A.5.1b)$$

$$g^{(2)} = -\frac{1}{H^{(0)}} \left[-\frac{M^{(1)}}{H^{(0)}} \right]^2 - \frac{M^{(2)}}{H^{(0)}} - \frac{1}{8D_D^{(2)}} (H^{(0)} g^{(0)}) \right] . \quad (A.5.1c)$$

Die Orts-, Impuls- und Energieargumente sind unterdrückt; $D_D^{(2)}$ ist (bis auf Faktoren) der Poissonklammeroperator 2. Ordnung.

Im folgenden wird der letzte Term von $g^{(2)}$ näher untersucht. Es seien die Abkürzungen

$$\partial_{r_i} := \frac{\partial}{\partial r_i} , \quad \partial_r := \frac{\partial}{\partial r} \quad (\text{analog für die Impulsableitungen})$$

sowie die Einsteinkonvention vereinbart.

$$\begin{aligned} D_D^{(2)} (H^{(0)} g^{(0)}) &= -\frac{1}{(H^{(0)})^2} \left[2 \left(\frac{\delta_{ij}}{m} + (\partial_{p_i} \partial_{p_j} M^{(0)}) \right) (\partial_{r_i} \partial_{r_j} M^{(0)}) - \right. \\ &\quad \left. 2 (\partial_{r_i} \partial_{p_j} M^{(0)}) (\partial_{p_i} \partial_{r_j} M^{(0)}) \right] - \frac{1}{(H^{(0)})^3} \left[2 \left(\frac{p_j}{m} + (\partial_{p_j} M^{(0)}) \right) \left(\frac{p_i}{m} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. (\partial_{p_i} M^{(0)}) \right) (\partial_{r_i} \partial_{r_j} M^{(0)}) - 4 \left(\frac{p_i}{m} + (\partial_{p_i} M^{(0)}) \right) (\partial_{r_j} M^{(0)}) (\partial_{r_i} \partial_{p_j} M^{(0)}) + \right. \end{aligned}$$

$$2\left(\frac{\delta_{ij}}{m} + (\partial_{p_i} \partial_{p_j} M^{(0)}) (\partial_{r_i} M^{(0)}) (\partial_{r_j} M^{(0)})\right) \quad (A.5.2)$$

Zu einer ersten Vereinfachung dieses Ausdrucks gelangt man durch Ausnützen des Umstands, daß $H^{(0)}$ nur von $|\vec{r}|$ abhängt (vgl. die Argumentation in Kapitel 5.1.). Macht man darüberhinaus die in der Literatur [GV79,80] übliche und plausible Annahme, daß dasselbe auch für die Impulsabhängigkeit von $H^{(0)}$ gilt, d.h. daß $H^{(0)}$ auch invariant bei Rotation im Impulsraum ist, so lassen sich die Differentiationen in (A.5.2) vereinfachen und als winkelmittelte Ausdrücke schreiben. Im speziellen gilt:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{r_i r_j p_i p_j}{r^2 p^2} \right\rangle &= \frac{1}{3}, \\ \left\langle \left(\delta_{ij} - \frac{r_i r_j}{r^2} \right) \frac{p_i p_j}{p^2} \right\rangle &= \frac{2}{3}, \\ \left\langle \left(\delta_{ij} - \frac{r_i r_j}{r^2} \right) \left(\delta_{ij} - \frac{p_i p_j}{p^2} \right) \right\rangle &= \frac{4}{3}, \end{aligned} \quad (A.5.3)$$

wobei

$$\langle f(\vec{p}) \rangle := \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_p f(\vec{p}) \quad (A.5.4)$$

Damit erhält man für (A.5.2):

$$D_D^{(2)}(H^{(0)} g^{(0)}) = -B \left(\frac{B_2}{(H^{(0)})^2} + \frac{B_3}{(H^{(0)})^3} \right); \quad (A.5.5)$$

$$B_2 = \frac{1}{12} \left[\left(\frac{3}{m} + (\Delta_p M^{(0)}) \right) (\Delta_r M^{(0)}) - (\partial_r \partial_p M^{(0)})^2 \right], \quad (A.5.6)$$

$$\begin{aligned} B_3 = \frac{1}{12} & \left[\left(\frac{p}{m} + (\partial_p M^{(0)}) \right)^2 (\Delta_r M^{(0)}) + \left(\frac{3}{m} + (\Delta_p M^{(0)}) \right) (\partial_r M^{(0)})^2 - \right. \\ & \left. 2(\partial_r M^{(0)}) \left(\frac{p}{m} + (\partial_p M^{(0)}) \right) (\partial_r \partial_p M^{(0)}) \right]. \end{aligned} \quad (A.5.7)$$

(Die Orts- und Impulsargumente von $M^{(0)}$ und $H^{(0)}$ werden der einheitlichen Darstellung wegen weiterhin in Vektorform geschrieben. Bei der numerischen Auswertung wird auf die Form (A.5.5) zurückgegriffen.)

In der weiteren Behandlung der Einteilchengreenfunktion (A.5.1) wird die übliche Quasiteilchennäherung vorgenommen, d.h. die im Nenner stehenden

$$H^{(0)} \equiv H^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = \epsilon - \frac{p^2}{2m} - M^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) \quad (\text{A.5.8})$$

werden durch

$$H^{(0)} \longrightarrow \epsilon - \frac{p^2}{2m} - \text{Re } M^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) \pm i\eta \quad (\text{A.5.9})$$

ersetzt.

In gleicher Weise werden von den im Zähler auftretenden $M^{(i)}$ nur die Realteile berücksichtigt. Diese Vernachlässigung der Imaginärteile ist vertretbar, da die hier behandelten Korrekturen nur für Energien unterhalb der Fermikante benötigt werden (bis auf $M^{(2)}$ in $K^{(2)}$, s. Kapitel 5.3.) und der Imaginärteil der Einteilchengreenfunktion in diesem Bereich als klein angenommen werden kann; im speziellen Fall der Standard-BHF-Theorie verschwindet er sogar exakt. Darüberhinaus werden die Beiträge $M^{(1)}$ und $M^{(2)}$ später ohnehin in HF-Näherung berechnet (s. Kapitel 4.4.2.), in der die Imaginärteile Null sind.

Die von der ETF-Theorie her bekannten Gradienten- und Krümmungsterme gewinnt man aus den Potentialfunktionen B_2 und B_3 , Gln. (A.5.6,7), durch Ersetzen des Massenoperators $M^{(0)}$ durch ein lokales effektives Einteilchenpotential $V(r)$ [RS80]:

$$B_2^{\text{ETF}} = \frac{1}{4m} \Delta_r V(r) , \quad (\text{A.5.10})$$

$$B_3^{\text{ETF}} = \frac{1}{12} \left[\left(\frac{p}{m} \right)^2 \Delta_r V(r) + \frac{3}{m} (\nabla_r V(r))^2 \right] . \quad (\text{A.5.11})$$

A.6. Umordnung des Iterationsschemas für die Leitergleichung

Den Ausgangspunkt für die Umordnung bildet die Leitergleichung in der allgemeinen Impulsdarstellung (4.20a). Nimmt man eine Wignertransformation beider Gleichungsseiten bezüglich der Schwerpunktskoordinaten vor, so erhält man:

$$K(\vec{R}, \vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = 2 \bar{v}(\vec{p}, \vec{p}') + \iint d^3q d^3q' \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \int d^3Q e^{i\vec{R} \cdot \vec{Q}} \times \\ \Lambda(\vec{P} + \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{Q}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K(\vec{Q}, \vec{P} - \frac{\vec{Q}}{2}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon) . \quad (A.6.1)$$

Die entsprechende Gleichung in 0. Ordnung der semiklassischen Entwicklung, d.h. in Kernmaterienäherung, lautet:

$$K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) = 2 \bar{v}(\vec{p}, \vec{p}') + \iint d^3q d^3q' \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \times \\ \Lambda^{(0)}(\vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon) . \quad (A.6.2)$$

Umstellen von (A.6.2):

$$\bar{v} = \frac{1}{2} (K^{(0)} - \bar{v} \Lambda^{(0)} K^{(0)}) , \quad (A.6.3)$$

Einsetzen in (A.6.1) und Addition des Terms:

$$\iint d^3q d^3q' \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon) \quad (A.6.4)$$

auf beiden Seiten liefert:

$$\iint d^3q d^3q' [\delta(\vec{p} - \vec{q}) \delta(\vec{q} - \vec{q}') - \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon)] K(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon) = \\ = \iint d^3q d^3q' [\delta(\vec{p} - \vec{q}) \delta(\vec{q} - \vec{q}') - \bar{v}(\vec{p}, \vec{q}) \Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon)] \times$$

$$\begin{aligned}
 K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon) &= \iint d^3q d^3q' \left\{ \frac{1}{2} \iint d^3k d^3k' [\delta(\vec{p}-\vec{k}) \delta(\vec{k}-\vec{k}') - \right. \\
 &\left. \bar{v}(\vec{p}, \vec{k}) \Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{k}, \vec{k}'; \epsilon) \right] K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{k}', \vec{q}; \epsilon) \} \times [\Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) \times \\
 &K(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon) - \iint d^3Q d^3Q' e^{\frac{i}{\hbar} \vec{R} \vec{Q}} \Lambda(\vec{P} + \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{Q}'; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) \times \\
 &K(\vec{Q}', \vec{P} - \frac{\vec{Q}}{2}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon) \} . \quad (A.6.5)
 \end{aligned}$$

Multipliziert man die Gleichung mit

$$[1 - \bar{v} \Lambda^{(0)}]^{-1} , \quad (A.6.6)$$

so erhält man das Resultat:

$$\begin{aligned}
 K(\vec{R}, \vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) &= K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{p}, \vec{p}'; \epsilon) - \frac{1}{2} \iint d^3q d^3q' K^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{p}, \vec{q}; \epsilon) \times \\
 &[\Lambda^{(0)}(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K(\vec{R}, \vec{P}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon) - \\
 &\iint d^3Q e^{\frac{i}{\hbar} \vec{R} \vec{Q}} \iint d^3Q' \Lambda(\vec{P} + \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{Q}'; \vec{q}, \vec{q}'; \epsilon) K(\vec{Q}', \vec{P} - \frac{\vec{Q}}{2}; \vec{q}', \vec{p}'; \epsilon)] . \quad (A.6.7)
 \end{aligned}$$

Der zweite Term der eckigen Klammer stellt die Wignertransformierte des Operatorprodukts $\Lambda \times K$ dar und läßt sich daher mit Hilfe des Poissonklammeroperators der Wigner-Kirkwood-Entwicklung auf die in (4.32) angegebene Form bringen.

A.7. Beweis des Verschwindens der 1. Ordnung der Differentialoperatoren in der semiklassischen Entwicklung

Bei der Behandlung der ersten semiklassischen Korrekturen zur LDA in Kapitel 4.4. wird das Verschwinden derjenigen Beiträge ausgenutzt, welche Differentialoperatoren der 1. Ordnung enthalten. Es handelt sich um die Terme:

$$[g^{(i)} g^{(j)}]_A^{(1)}, \quad (A.7.1.a)$$

$$[K^{(i)} g^{(j)}]_F^{(1)}, \quad i, j = 0, 1 \quad (A.7.1.b)$$

$$[\Lambda^{(i)} K^{(j)}]_L^{(1)}; \quad (A.7.1.c)$$

(für die explizite Formulierung s. (4.45)).

Die Differentialoperatoren in (A.7.1.a und b) beinhalten Ableitungen nach den Relativimpulsen der $K^{(0)}$ -Matrix.

Für $[gg]_A^{(1)}$ haben die zu untersuchenden Terme die Struktur (nur die Relativkoordinaten sind notiert):

$$K^{(0)} [gg]_A^{(1)} K^{(0)} \sim K^{(0)}(\vec{q}, \vec{q}') [(\vec{\nabla}_q, -\vec{\nabla}_{q'}) (\vec{\nabla}_r - \vec{\nabla}_{r'}) g(\vec{r}) g(\vec{r}')]] \times K^{(0)}(\vec{q}', \vec{q})|_{\vec{q}'=\vec{q}}. \quad (A.7.2)$$

Da

$$\nabla_q K^{(0)}(\vec{q}, \vec{q}')|_{\vec{q}'=\vec{q}} = \nabla_{q'} K^{(0)}(\vec{q}, \vec{q}')|_{\vec{q}'=\vec{q}} \quad (A.7.3)$$

gilt und die K-Matrix in der Faltungsgleichung nur für Diagonalmatrixelemente bezüglich der Relativimpulse benötigt wird, ergibt sich das Ver-

schwinden aller Beiträge, die proportional $[gg]_{\Lambda}^{(1)}$ sind:

$$[\nabla_{\vec{q}}, K^{(0)}(\vec{q}, \vec{q}') (\nabla_{\vec{r}} - \nabla_{\vec{r}'})(g^{(i)}(\vec{r}) g^{(j)}(\vec{r}')) - \nabla_{\vec{q}} K^{(0)}(\vec{q}, \vec{q}') \times \\ (\nabla_{\vec{r}} - \nabla_{\vec{r}'})(g^{(i)}(\vec{r}) g^{(j)}(\vec{r}'))]_{\vec{q}' = \vec{q}} = 0 \quad . \quad (A.7.4)$$

Mit ähnlichen Argumenten läßt sich das Verschwinden aller Terme der Art (A.7.1.b) zeigen:

$$[K^{(i)} g^{(j)}]_F^{(1)} \sim (\nabla_{\vec{q}'} - \nabla_{\vec{q}''})(\nabla_{\vec{r}'} + 2\nabla_{\vec{r}}) K^{(i)}(\vec{r}', \vec{p}; \vec{q}', \vec{q}'') \times \\ g^{(j)}(\vec{r}, \vec{q})|_{\vec{q}' = \vec{q}''} \quad . \quad (A.7.5)$$

Wieder wird die K-Matrix nur für Diagonalelemente gebraucht, wofür der Ausdruck (A.7.5) Null ergibt.

Die Differentiationen des letzten Ausdrucks (A.7.1.c) wirken auf die Schwerpunktskoordinaten der K-Matrix und des Zweiteilchenpropagators. Da beide nur vom Betrag des Schwerpunktsimpulses abhängen, vgl. Kapitel 5.1., kann man

$$[\Lambda^{(i)} K^{(j)}]_L^{(1)} \sim \frac{1}{\vec{p}} \partial_P K^{(j)}(R, P) (\vec{p} \nabla_R) \Lambda^{(i)}(R, P) - \\ \frac{1}{\vec{p}} \partial_P \Lambda^{(i)}(R, P) (\vec{p} \nabla_R) K^{(j)}(R, P) \quad (A.7.6)$$

schreiben. Nach den bei semiklassischen Entwicklungen üblichen Impulswinkelmittelungen, vgl. Anhang A.5., ergibt (A.7.6) Null, da der Impulsvektor $\vec{p}$ mit ungerader Potenz auftritt.

A.8. Beweis des Verschwindens der 1. Ordnung der semiklassischen

Entwicklung des effektiven Einteilchenpotentials

in Hartree-Fock-Näherung

Die beiden Gleichungen der 1. Ordnung der semiklassischen Entwicklung des Gleichungssystems der Leiternäherung in Hartree-Fock-Approximation lauten (vgl. Kapitel 4.4.2., Gln.(4.53); der Index "HF" ist unterdrückt):

$$M^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = -i \frac{d\epsilon'}{2\pi M} e^{i\eta\epsilon'} \int d^3q \, 2\bar{v}(\frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}) M^{(1)}(\vec{r}, \vec{q}; \epsilon') , \quad (A.8.1)$$

$$g^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) = M^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) (g^{(0)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon))^2 . \quad (A.8.2)$$

Einsetzen von (A.8.2) in (A.8.1) liefert unter Ausnützung der Spektraldarstellung (3.22) für $g^{(0)}$ und Ausführung der Energieintegration:

$$M^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}; \epsilon) \equiv M^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}) = \int d^3q \, 2\bar{v}(\frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}) M^{(1)}(\vec{r}, \vec{q}) \times \\ [-\delta(\epsilon_F(r) - E(\vec{r}, \vec{q}))] . \quad (A.8.3)$$

Da nur $\bar{v}$ von den Winkelvariablen von $\vec{q}$ abhängt, sei folgendes Winkelintegral über $\bar{v}$ definiert (Dabei wird ausgenützt, daß $M(\vec{r}, \vec{p})$ nur von den Beträgen $|\vec{r}|$ und $|\vec{p}|$ abhängt.):

$$\tilde{v}(p, q) := \int d\Omega_q \, \bar{v}(\frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}, \frac{\vec{p}-\vec{q}}{2}) . \quad (A.8.4)$$

Des weiteren ist die Nullstelle der Argumentfunktion der δ -Funktion durch $q=p_F(r)$ gegeben, und die δ -Funktion selbst läßt sich bei Anwendung der effektive-Masse-Näherung

$$\epsilon_F - E \approx \frac{p_F^2 - q^2}{2m^*} \quad (\text{A.8.5})$$

in

$$\delta(\epsilon_F - E) = \frac{m^*}{p_F} \delta(q - p_F) \quad (\text{A.8.6})$$

umformen.

(A.8.3) lautet dann:

$$M^{(1)}(r, p) = -4\pi m^* p_F \tilde{v}(p, p_F) M^{(1)}(r, p_F). \quad (\text{A.8.7})$$

Unter der Annahme, daß $M^{(1)}(r, p_F(r)) \neq 0$ ist, folgt hieraus speziell für $p = p_F(r)$, daß für jede beliebige Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung $\tilde{v}$

$$\tilde{v}(p_F, p_F) = -\frac{1}{4\pi m^* p_F} \quad (\text{A.8.8})$$

gilt. Da dies nicht zutrifft, ist die Annahme falsch, mithin

$M^{(1)}(r, p_F(r)) = 0$. Hieraus folgt mit (A.8.7), daß $M^{(1)}(r, p) = 0$ gilt.

A.9. Die Behandlung höherer Potenzen der Einteilchen-

greenfunktion $(g^{(0)})^1$

Bei der Berechnung der semiklassischen Korrekturen durch den Einteilchenpropagator, Kapitel 5.2., und die Faltungsgleichung, Kapitel 5.4., treten höhere Potenzen der Einteilchengreenfunktion $g^{(0)}$ auf, deren Behandlung hier dargestellt werden soll. (Der Index "(0)" wird im weiteren Verlauf dieses Kapitels unterdrückt.)

Für die Quasiteilchenapproximation (3.23) ist wegen der Idempotenz der θ -Funktion die Annahme naheliegend, daß

$$g^1(\epsilon) = \alpha(\epsilon - \epsilon_F) \frac{\theta(E - \epsilon_F) n_{>}^1 + \theta(\epsilon_F - E) n_{<}^1}{(\epsilon - E + i\eta)^1} + \theta(\epsilon_F - \epsilon) \frac{\theta(E - \epsilon_F) n_{>}^1 + \theta(\epsilon_F - E) n_{<}^1}{(\epsilon - E - i\eta)^1} \quad (\text{A.9.1})$$

gilt. Diese Vermutung stellt sich allerdings nur als näherungsweise gültig heraus.

g^1 tritt in den hier interessierenden Fällen immer in Integralen der Art:

$$I_1 = \int_C d\epsilon f(\epsilon) (g(\epsilon))^1 \quad (\text{A.9.2})$$

auf. C bezeichnet den komplexen (geschlossenen) Integrationsweg in der oberen Halbebene; $f(\epsilon)$ ist eine analytische, hinreichend reguläre Funktion. $g(\epsilon)$ ist durch die Dysongleichung (3.8) und die physikalischen Grenzwerte durch (3.16,17) gegeben:

$$\tilde{g}(z) = \frac{1}{z - \frac{p}{2m} - \tilde{M}(z)}, \quad (\text{A.9.3})$$

$$g(\epsilon) = \theta(\epsilon - \epsilon_F) g_r(\epsilon) + \theta(\epsilon_F - \epsilon) g_a(\epsilon) \quad . \quad (A.9.4)$$

In der Quasiteilchennäherung wird der Imaginärteil von $\tilde{M}(z)$ an der Polstelle z_0 :

$$z_0 - \frac{p}{2m} - \tilde{M}(z_0) = 0 \quad (A.9.5)$$

als infinitesimal klein angenommen; g_r und g_a haben daher die Form:

$$g_{r/a}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \frac{p}{2m} - \text{Re } M(\epsilon) \pm i\eta} \quad . \quad (A.9.6)$$

Es sind somit Integrale der Art

$$I_1 = \int_C d\epsilon f(\epsilon) \left(\frac{1}{\epsilon - h(\epsilon) \pm i\eta} \right)^l \quad (A.9.7)$$

zu untersuchen, deren Integranden einen l-fachen Pol besitzen.

Für den Fall "+iη" ist das Integral Null, da der Pol in der unteren Halbebene liegt. Für den anderen Fall "-iη" gilt:

$$I_1 = 2\pi i \text{ Res } \left[\frac{f(\epsilon)}{(\epsilon - h(\epsilon))^l} \right]_{\epsilon=\epsilon_0} \quad , \quad (A.9.8)$$

$$\epsilon_0 - h(\epsilon_0) = 0 \quad .$$

Die Laurententwicklung des Integranden lautet:

$$\frac{f(\epsilon)}{(\epsilon - h(\epsilon))^l} = \frac{a_{-l}}{(\epsilon - \epsilon_0)^l} + \dots + \frac{a_{-1}}{\epsilon - \epsilon_0} + a_0 + a_1(\epsilon - \epsilon_0) + \dots \quad ; \quad (A.9.9)$$

das Residuum erhält man aus:

$$a_{-1} = \frac{1}{(1-1)!} \frac{d^{1-1}}{d\epsilon^{1-1}} \left[\frac{f(\epsilon)}{(\epsilon-h(\epsilon))^1} (\epsilon-\epsilon_0)^1 \right]_{\epsilon=\epsilon_0} \quad (\text{A.9.10})$$

Der Fall $l = 1$ entspricht dem üblichen Auftreten der Einteilchengreenfunktion und liefert als Ergebnis:

$$I_1 = 2\pi i (1 - h^{(1)}(\epsilon_0))^{-1} f(\epsilon_0), \quad (\text{A.9.11})$$

$$h^{(i)} := \frac{d^i}{d\epsilon^i} h(\epsilon) \Big|_{\epsilon=\epsilon_0},$$

also exakt den Ausdruck, den man bei Verwendung der Quasiteilchen-Spektralfunktion (3.23) unmittelbar erhält.

Zur Untersuchung des allgemeinen Ausdrucks (A.9.10) wird die eckige Klammer umgeschrieben; für den Nenner gilt:

$$\frac{1}{(\epsilon-h(\epsilon))^1} = \frac{1}{(\epsilon-\epsilon_0)^1} \frac{1}{(1-h^{(1)} - \sum_{i=2}^{\infty} \frac{1}{i!} h^{(i)} (\epsilon-\epsilon_0)^{i-1})^1}, \quad (\text{A.9.12})$$

mit der Taylorentwicklung für $h(\epsilon)$:

$$h(\epsilon) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} h^{(i)} (\epsilon-\epsilon_0)^i. \quad (\text{A.9.13})$$

Einsetzen von (A.9.12) in (A.9.10) liefert:

$$\frac{d^{l-1}}{d\epsilon^{l-1}} \left[f(\epsilon) \frac{1}{(1-h^{(1)} - \sum_{i=2}^{\infty} \frac{1}{i!} h^{(i)} (\epsilon-\epsilon_0)^{i-1})^1} (\epsilon-\epsilon_0)^1 \right]_{\epsilon=\epsilon_0} = \quad (\text{A.9.14})$$

$$\left[\frac{d^{l-1}}{d\epsilon^{l-1}} f(\epsilon) \right]_{\epsilon=\epsilon_0} \frac{1}{(1-h^{(1)})^1} + \left[\frac{d^{l-2}}{d\epsilon^{l-2}} f(\epsilon) \right]_{\epsilon=\epsilon_0} \frac{1(1-1) \frac{1}{2} h^{(2)}}{(1-h^{(1)})^{1+1}} + \dots$$

Bis auf den ersten Term enthalten alle Summanden in (A.9.14) als Faktoren zweite oder höhere Energieableitungen des Massenoperators $h^{(i)} \sim$

$\frac{d}{d\epsilon} \operatorname{Re} M(\epsilon) \big|_{\epsilon_0}$). Da sich die Energieabhängigkeit des optischen Potentials in guter Näherung durch eine lineare Funktion beschreiben läßt [BHQ82], kann man sich auf den ersten Term in (A.9.14) beschränken und somit

$$I_1 = \frac{2\pi i}{(1-1)!} f^{(1-1)}(\epsilon_0) (1-h^{(1)}(\epsilon_0))^{-1} \quad (\text{A.9.15})$$

schreiben.

Da

$$\left(1 - \frac{\partial}{\partial \epsilon} \operatorname{Re} M(\epsilon) \big|_{\epsilon=E}\right)^{-1} = \begin{cases} n_{>} & E > \epsilon_F \\ n_{<} & E < \epsilon_F \end{cases} \quad (\text{A.9.16})$$

gilt, ist

$$\left(1 - \frac{\partial}{\partial \epsilon} \operatorname{Re} M(\epsilon) \big|_{\epsilon=E}\right)^{-1} = \theta(E-\epsilon_F) n_{>}^1 + \theta(\epsilon_F-E) n_{<}^1, \quad (\text{A.9.17})$$

und I_1 läßt sich in folgender Weise ausdrücken:

$$I_1 = \int_C d\epsilon \, f(\epsilon) \frac{\theta(E-\epsilon_F) n_{>}^1 + \theta(\epsilon_F-E) n_{<}^1}{(\epsilon - E \pm i\eta)^1}. \quad (\text{A.9.18})$$

Diese Formulierung ist der Verwendung von (A.9.1) für g^1 äquivalent und läßt nun auch die Anwendung der Formeln aus Anhang A.10. zu und damit eine explizite Berechnung von g^1 in (A.9.2):

$$(g(\epsilon))^1 = (g_r(\epsilon))^1 + \theta(\epsilon_F-\epsilon) [(g_a(\epsilon))^1 - (g_r(\epsilon))^1], \quad (\text{A.9.19})$$

$$\begin{aligned} [(g_a(\epsilon))^1 - (g_r(\epsilon))^1] &\approx 2\pi i (\theta(E-\epsilon_F) n_{>}^1 + \theta(\epsilon_F-E) n_{<}^1) \times \\ &\quad \frac{(-1)^{1-1}}{(1-1)!} \delta^{(1-1)}(\epsilon-E). \end{aligned} \quad (\text{A.9.20})$$

A.10. Darstellung und Behandlung einiger häufig auftretender

Distributionen

Wegen des Auftretens von $(g^{(0)})^n$ in den Kapiteln 5.2. bis 5.4. ist man mit der Auswertung höherer Potenzen der Distributionen $(x \pm i\eta)^{-n}$ konfrontiert (vgl. auch [Ki67, Anhang A]).

Für $n = 1$ gilt:

$$\frac{1}{x \pm i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x) \quad , \quad (\text{A.10.1})$$

$$\frac{1}{x+i\eta} - \frac{1}{x-i\eta} = -2\pi i \delta(x) \quad . \quad (\text{A.10.2})$$

$\mathcal{P}$ symbolisiert ein Hauptwertintegral, d.h.

$$\mathcal{P} \int dx \frac{f(x)}{x} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left(\int_{-\infty}^{-\eta} dx \frac{f(x)}{x} + \int_{\eta}^{\infty} dx \frac{f(x)}{x} \right) \quad , \quad (\text{A.10.3})$$

wobei f eine Grundfunktion ist.

Bei (A.10.1,2) handelt es sich um den Spezialfall von Regularisierungen der Funktionen [GS67]:

$$x_{+}^{-n} = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ |x|^{-n} & x > 0 \end{cases} \quad , \quad x_{-}^{-n} = \begin{cases} 0 & x > 0 \\ |x|^{-n} & x < 0 \end{cases} \quad , \quad (\text{A.10.4})$$

bzw. ihrer geraden oder ungeraden Kombinationen:

$$\begin{aligned} x^{-2n} &= x_{+}^{-2n} + x_{-}^{-2n} \quad , \\ &\quad (n \in \mathbb{N}) \\ x^{-2n+1} &= x_{+}^{-2n+1} - x_{-}^{-2n+1} \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.10.5})$$

(Genauer meint diese Schreibweise den folgenden Grenzwert (für Details

s. [GS67]):

$$x_{\pm}^{-n} = \lim_{\lambda \rightarrow -n} \frac{\partial}{\partial \lambda} ((\lambda+n)x_{\pm}^{\lambda}) , \quad \lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{N}, \quad n \in \mathbb{N} ,$$

$$x_{+}^{\lambda} = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ x^{\lambda} & x > 0 \end{cases} , \quad x_{-}^{\lambda} = \begin{cases} 0 & x > 0 \\ x^{\lambda} & x < 0 \end{cases} . \quad (\text{A.10.6})$$

Es gilt $(f^{(n)})(x) := \frac{d^n}{dx^n} f(x)$:

$$(x^{-2n}, f) = \int_0^{\infty} dx \, x^{-2n} [f(x) + f(-x) - 2(f(0) + \frac{x^2}{2!} f^{(2)}(0) + \dots + \frac{x^{2n-2}}{(2n-2)!} f^{(2n-2)}(0))] , \quad (\text{A.10.7})$$

$$(x^{-2n+1}, f) = \int_0^{\infty} dx \, x^{-2n+1} [f(x) - f(-x) - 2(x f^{(1)}(0) + \frac{x^3}{3!} f^{(3)}(0) + \dots + \frac{x^{2n-3}}{(2n-3)!} f^{(2n-3)}(0))] . \quad (\text{A.10.8})$$

Der Fall $n = 1$ für (A.10.8):

$$(x^{-1}, f) = \int_0^{\infty} dx \, \frac{f(x) - f(-x)}{x} \quad (\text{A.10.9})$$

ist identisch mit der Definition des Hauptwertintegrals (A.10.3); höhere Werte für n lassen sich als Verallgemeinerung der Hauptwertintegraldefinition verstehen, z.B. $n = 1$ für (A.10.7):

$$(x^{-2}, f) = \int_0^{\infty} dx \, \frac{f(x) + f(-x) - 2f(0)}{x^2} . \quad (\text{A.10.10})$$

Die höheren Potenzen der Distribution $(x \pm i\eta)^{-n}$ kann man in entsprechender Weise verallgemeinern; es gilt [GS67]:

$$(x \pm i\eta)^{-n} = x^{-n} \mp i\pi \frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!} \delta^{(n-1)}(x) , \quad (\text{A.10.11})$$

$$(x+i\eta)^{-n} - (x-i\eta)^{-n} = -2\pi i \frac{(-1)^{n-1}}{(n-1)!} \delta^{(n-1)}(x) . \quad (\text{A.10.12})$$

Die Ableitungen der δ -Funktion sind durch

$$\begin{aligned} \int dx \delta^{(n)}(x) f(x) &= (-1)^n \int dx f^{(n)}(x) \delta(x) = \\ &= (-1)^n f^{(n)}(0) \end{aligned} \quad (\text{A.10.13})$$

definiert.

Abschließend seien die Formeln für den Fall angegeben, daß das Argument der δ -Funktion von einer (mehrmals stetig differenzierbaren) Funktion $g(x)$ gebildet wird (, die der Einfachheit halber eine einzige einfache Nullstelle x_0 besitze und monoton sei):

$$I_n = \int dx f(x) \delta^{(n)}(g(x)) . \quad (\text{A.10.14})$$

Die Fälle $n = 0, 1, 2$ lauten ($g' := g^{(1)}$ usw.):

$$I_0 = \text{sgn}(g'(x_0)) g'^{-1}(x_0) f(x_0) , \quad (\text{A.10.15})$$

$$I_1 = -\text{sgn}(g'(x_0)) [g'^{-2}(x_0) f'(x_0) - g''(x_0) g'^{-3}(x_0) f(x_0)] , \quad (\text{A.10.16})$$

$$\begin{aligned} I_2 = \text{sgn}(g'(x_0)) [g'^{-3}(x_0) f''(x_0) - 3g''(x_0) g'^{-4}(x_0) f'(x_0) - \\ (g'''(x_0) g'(x_0) - 3g''^2(x_0)) g'^{-5}(x_0) f(x_0)] . \end{aligned} \quad (\text{A.10.17})$$

In der vorliegenden Arbeit ist g durch

$$g \equiv g(q) = \epsilon_F(r) - E(r, q) \quad (\text{A.10.18})$$

gegeben; es läßt sich mittels der effektive Masse-Näherung in

$$\epsilon_F(r) - E(r, q) \approx \frac{p_F^2(r) - q^2}{2m^*(r)} \quad (\text{A.10.19})$$

umformen.

Mit $f(q) = q^2 t(q)$ lauten (A.10.15-17) dann:

$$\int dq \, q^2 t(q) \delta(g(q)) = m^* p_F t(p_F) , \quad (\text{A.10.20})$$

$$\int dq \, q^2 t(q) \delta'(g(q)) = \frac{m^*}{p_F} (p_F t(p_F) + p_F^2 t'(p_F)) , \quad (\text{A.10.21})$$

$$\int dq \, q^2 t(q) \delta''(g(q)) = \frac{m^*}{p_F} (t(p_F) - p_F t'(p_F) - p_F^2 t''(p_F)) . \quad (\text{A.10.22})$$

Die an dieser Stelle für den Fall $p_F \rightarrow 0$ auftretenden Singularitäten entsprechen den im Kapitel 4.3.1. beschriebenen Singularitäten der ETF-Theorie am klassischen Umkehrpunkt und lassen sich mit den dort angesprochenen Mitteln beheben.

Tab. 1 : Parameter der Wechselwirkung von [WW68]

(s. (6.18,27))

	Singulett (S=0)	Triplet (S=1)
$a_1^S \text{ (fm}^{-1}\text{)}$	1.210	1.280
$a_2^S \text{ (fm}^{-1}\text{)}$	5.960	12.770
$\bar{\lambda}_1^S \text{ (fm}^{-3}\text{)}$	-4.270	-6.390
$\bar{\lambda}_2^S \text{ (fm}^{-3}\text{)}$	268.5	2840.
$\alpha_i^S = M a_i^S ; \quad \lambda_i^S = \frac{2M^3}{\pi m} \bar{\lambda}_i^S ; \quad m = 938.904 \text{ MeV/c}^2$		

Tab. 2 : Parameter der Puff-Wechselwirkung [Pu61]

(s. (6.28,29))

	Singulett (S=0)	Triplet (S=1)
$a^S \text{ (fm}^{-1}\text{)}$	2.004	2.453
$\bar{\lambda}^S \text{ (fm}^{-3}\text{)}$	-3.640	-8.695
$\rho_c \text{ (fm)}$	0.45	0.45
$\alpha^S = M a^S ; \quad \lambda^S = \frac{4\pi M^3}{m} \bar{\lambda}^S ; \quad r_c = M^{-1} \rho_c ;$ $m = 938.904 \text{ MeV/c}^2$		

Tab. 3 : Parameter des Perey-Buck-Potentials (s. (7.1))

(Parametrisierung des Realteils des effektiven Einteilchenpotentials für Energien $E < \epsilon_F$)

A	40	120	208
V_0 (MeV)	-87.00	-87.30	-85.90
r_0 (fm)	1.100	1.135	1.140
a_0 (fm)	0.580	0.580	0.560
β (fm)	0.907	0.904	0.905

Tab. 4 : Parameter der Dichtefunktion (7.10) und die speziellen Werte für $A = 40, 120$ und 208

r_0 (fm)	r'_0 (fm)	a_0 (fm)
0.978	0.0206	0.540

A	40	120	208
ρ_0 (fm ⁻³)	0.169	0.172	0.168
R (fm)	3.586	5.325	6.518
$R/A^{1/3}$ (fm)	1.048	1.080	1.100

Tab. 5 : Vergleich der Fermiimpulswerte aus (5.13) (Fermigas:

FG) und (7.11) für verschiedene Orte r bzw.

Dichten ρ ($A = 208$)

	r (fm)	ρ (fm ⁻³)	p_F^{FG} (MeV/c)	p_F (MeV/c)
Kerninneres	1.0	0.168	267.4	270.8
Kernoberfläche	6.5	0.085	213.3	218.7
äußerer Kern- rand	8.0	0.010	104.9	122.7

Tab. 6 : Parameter des optischen Potentials (8.1) für $A = 208$ (bzw. 208pb)

und die Energie $E = 30$ MeV

		V (MeV)	r_V (fm)	a_V (fm)	W (MeV)	W_S (MeV)	r_W (fm)	a_W (fm)
Neutronen	isoskalar	-46.70	1.17	0.75	-5.04	-5.50	1.26	0.58
	voll	-41.62				-2.96		
Exp.	isoskalar	-44.40	1.17	0.75	-3.90	-4.30	1.32	0.51
	voll	-55.01				-6.84		0.66
Protonen	isoskalar	-43.30	1.16	0.75	-3.90	-2.70	1.37	0.50
	voll	-54.42				-5.98		0.71
LDA, Protonen	isoskalar*	-45.40	1.19	0.53	-5.00	-10.20	1.14	(0.37)
	voll	-56.00				-12.70		0.52
impr. LDA, Protonen,	isoskalar*	-43.00	1.21	0.62	-5.80	-5.70	1.19	(0.46)
	voll	-53.60				-7.90		0.61
LDA, diese Arbeit	isoskalar	-43.80	1.15	0.58	-4.55	-4.40	1.22	0.63
LDA+Korrekturen diese Arbeit	isoskalar	-43.80	1.11	0.78	-4.60	-6.50	1.30	0.54

* s. Tab. 7, Anmerkung (**)

Tab. 7 : Volumenintegral J/A und rms-Radius $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ des optischen Potentials für $A = 208$ (bzw. ^{208}Pb) und die Energie $E = 30 \text{ MeV}$ (s. (8.4,5)), Realteil

		$J/A \text{ (MeV fm}^3\text{)}$	$\langle r^2 \rangle^{1/2} \text{ (fm)}$
Exp.	Neutronen isoskalar	349.5	6.050
	[BG69] voll	311.5	6.050
	Protonen isoskalar	332.3	6.050
	[BG69] voll	411.7	6.050
	Protonen isoskalar	316.4	6.010
	[MGM71] voll	397.6	6.010
LDA, Protonen isoskalar		-	-
[BR77b] voll		392.5	5.870
FMIA [*] , Protonen isoskalar		-	-
[BR77b] voll		406.1	6.240
LDA, Protonen isoskalar**		338.3	5.860
[JLM77b] voll		417.3	5.860
impr. LDA, Protonen isoskalar**		342.6	6.012
[JLM77b] voll		427.1	6.012
LDA, diese Arbeit isoskalar		297.9	5.650
LDA+Korrekturen diese Arbeit isoskalar		288.7	5.823

* FMIA : "Folded Microscopic Interaction"-Methode

** aus den "vollen" Werten durch Subtraktion der von [BG69] angegebenen Isektor- und Coulombkorrekturbeiträge gewonnen

Tab. 8 : Volumenintegral J/A und rms-Radius $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ des optischen Potentials für $A = 208$ (bzw. ^{208}Pb) und die Energie $E = 30 \text{ MeV}$ (s. (8.4,5)), Imaginärteil

		$J/A \text{ (MeV fm}^3\text{)}$	$\langle r^2 \rangle^{1/2} \text{ (fm)}$
Exp.	Neutronen isoskalar	88.6	7.039
	[BG69] voll	68.3	6.789
	Protonen isoskalar	72.0	7.195
	[BG69] voll	108.3	7.666
	Protonen isoskalar	65.3	7.210
	[MGM71] voll	114.7	7.956
	LDA, Protonen isoskalar	-	-
	[BR77b] voll	69.4	7.000
FMIA *	Protonen isoskalar	-	-
	[BR77b] voll	75.4	7.510
LDA, Protonen	isoskalar **	74.0	6.312
	[JLM77b] voll	107.1	6.652
impr. LDA, Pro-	isoskalar	74.6	6.442
	tonen, [JLM77b] voll	103.3	6.851
LDA, diese Ar-	isoskalar	70.2	6.761
beit			
LDA+Korrekturen	isoskalar	91.6	7.217
diese Arbeit			

* FMIA : "Folded Microscopic Interaction"-Methode

** s. Tab. 7, Anmerkung (**)

Abbildungsunterschriften

Vorbemerkung: Die Summe der Korrekturen $MI(a+b)+MII(a+b)+MIII$ ist in den Abbildungen mit $M(2)$ bezeichnet. $M(2)$ unterscheidet sich vom Term $M^{(2)}$ des Entwicklungsschemas um den Faktor M^2 :
 $M(2) = M^2 M^{(2)}$.

In den meisten Abbildungen ist der Zahlenwert des Halbdichteteradius der benutzten Dichteverteilung angegeben; dieser ist mit R bezeichnet. In den Einzelbeschreibungen der Abbildungen ist dies nicht mehr gesondert erwähnt; analoges gilt für die Nukleonenzahl $A = 208$, für die die meisten Ergebnisse gerechnet wurden.

Abb. 1: Realteil der 3S_1 -Partialwelle von $K^{(0)}(r,p;p';\epsilon)$, (6.16), in Abhängigkeit von der Energie E für verschiedene Orte r ($\hat{=}$ verschiedene Dichten $\rho(r)$). Zum besseren Vergleich wurde (in "Materie") $E = \epsilon - \frac{p^2}{4m} - 2V(r, \frac{p}{2})$ gewählt. Das 'Insert' zeigt die freie (= Vakuum) K -Matrix für einen grösseren Energiebereich. ($1\text{fm}^{-1} \hat{=} 197.32\text{MeV}/c$)

Abb. 2: Vergleich des Realteils des selbstkonsistent errechneten effektiven Einteilchenpotentials in 0. (= LDA-) Ordnung $V(r,p) = \text{Re } M^{(0)}(r,p;E(r,p))$ (Kreise und Dreiecke) mit dem angepaßten Perey-Buck-Potential (7.1) (durchgezogene Kurven) in Abhängigkeit vom Impuls p für die zwei Orte $r = 1.0 \text{ fm}$ (Kerninneres) und $r = 6.5 \text{ fm}$ (Kernoberfläche); strichliert sind die jeweiligen Fermiimpulswerte angegeben.

Abb. 3: Verlauf der selbstkonsistent errechneten Wignerfunktion ($\hat{=}$ gemischte Dichte) $n(r,p)$ in Abhängigkeit vom Impuls p

für verschiedene Orte r ; strichliert sind die jeweiligen Fermiimpulswerte angegeben.

Abb. 4: Vergleich des Realteils des selbstkonsistent errechneten effektiven Einteilchenpotentials in O. (= LDA-) Ordnung $V(r,p) = \text{Re } M^{(0)}(r,p;E(r,p))$ (Kreise und Dreiecke) mit dem angepaßten Perey-Buck-Potential (7.1) (durchgezogene Kurven) in Abhängigkeit vom Ort r für die zwei Impulse $p = 0 \text{ MeV/c}$ und $p = p_F$. Strichliert und strichpunktirt ist der Verlauf der Fermienergie ϵ_F (7.12) und der kinetischen Energie an der Fermikante $(-)\frac{p_F^2}{2m}$ (7.11) eingetragen. Der obere Teil der Abbildung zeigt die in der Rechnung benutzte Dichte $\rho(r)$ (7.10). R ist der Halbdichteradius.

Abbn. 5 - 14: Real- und Imaginärteil der Korrekturen M_{Ia} , M_{Ib} , M_{IIa} , M_{IIb} und M_{III} in Abhängigkeit vom Ort r für verschiedene Energien E .

Abbn. 15 - 16: Real- und Imaginärteil der Summe der Korrekturen $M(2) = M_{Ia} + \dots + M_{III}$ in Abhängigkeit vom Ort r für verschiedene Energien E .

Abbn. 17 - 20: Real- und Imaginärteil der Korrekturen M_{Ia} - M_{III} in Abhängigkeit von der Energie E für die Orte $r = 6.0 \text{ fm}$ und $r = 8.0 \text{ fm}$.

Abbn. 21 - 22: Real- und Imaginärteil der Summe der Korrekturen $M(2)$ in Abhängigkeit vom Ort r für die Energie $E = 20 \text{ MeV}$, berech-

net mit der Wechselwirkung von [WW68] bzw. mit der Puff-Wechselwirkung [Pu61].

Abbn.

23 - 24:

Real- und Imaginärteil der Summe der Korrekturen $M(2)$ in Abhängigkeit vom Ort r für die Nukleonenzahlen $A = 40, 120$ und 208 bei der Energie $E = 30$ MeV. Der Nullpunkt der Ortsvariable r ist auf den jeweiligen Halbdichterradius R normiert (s. Tabelle im Diagramm).

Abbn.

25 - 28:

Real- und Imaginärteil des optischen Potentials mit und ohne Korrekturen in Abhängigkeit vom Ort r für verschiedene Energien E . Die strichpunktierten Linien zeigen die LDA-Näherung $M^{(0)}(r, E)$, die durchgezogenen Kurven den Verlauf von $M(r, E)$ bei zusätzlicher Berücksichtigung der Korrekturen $M(2)$.

Abbn.

29 - 34:

Volumenintegral J/A (8.4) und rms-Radius $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ (8.5) des Real- bzw. Imaginärteils des optischen Potentials (isoskalarer Anteil) in Abhängigkeit von der Energie E für die Nukleonenzahlen $A = 40, 120$ und 208 .

Das Ergebnis der LDA-Näherung ist strichliert gezeichnet; bei Berücksichtigung der Korrekturen $M(2)$ ergeben sich die durchgezogenen Kurven.

Zum Vergleich sind zusätzlich strichpunktiert die entsprechenden LDA- und "improved LDA"-Ergebnisse von [JLM77b] für das Proton-optische Potential eingetragen.

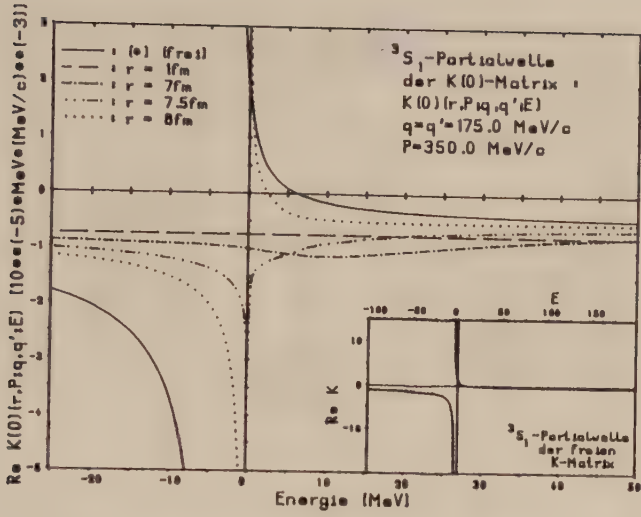


Abb. 1

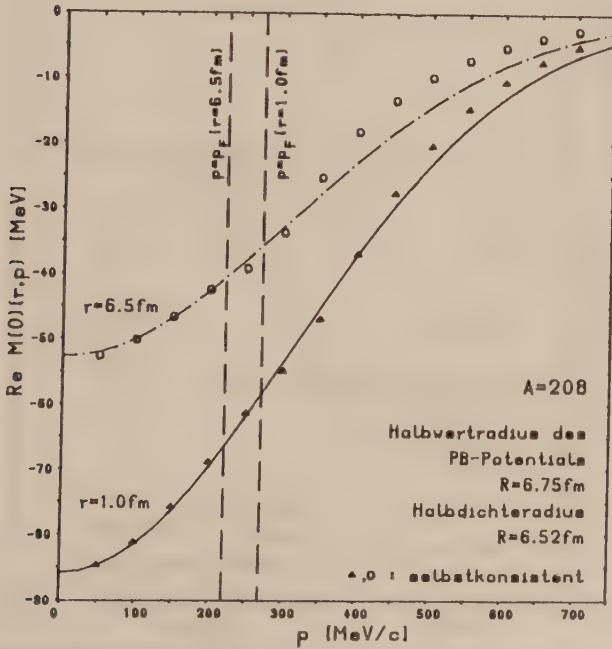


Abb. 2

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

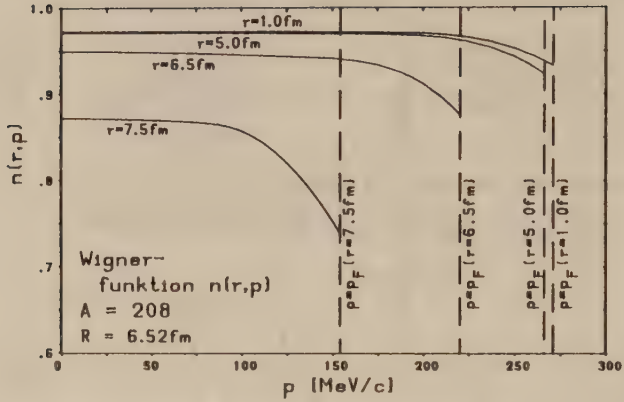


Abb. 3

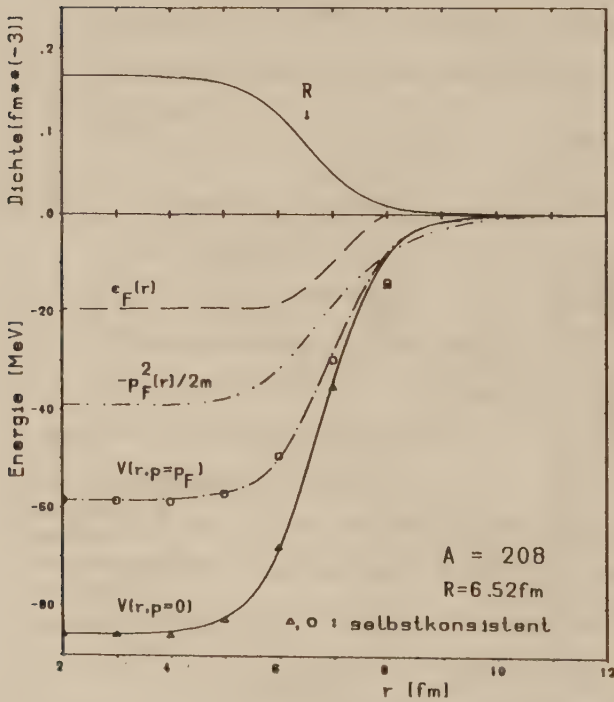


Abb. 4

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

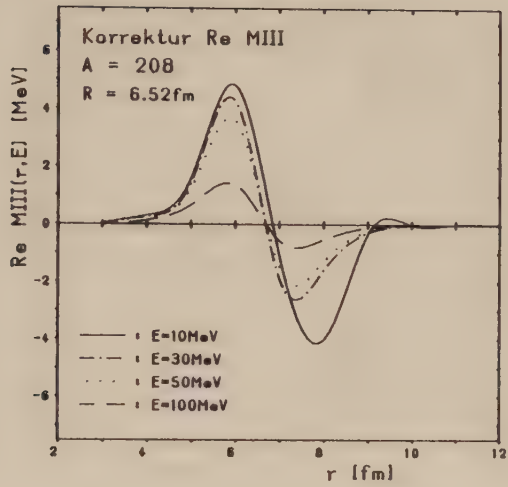


Abb. 5

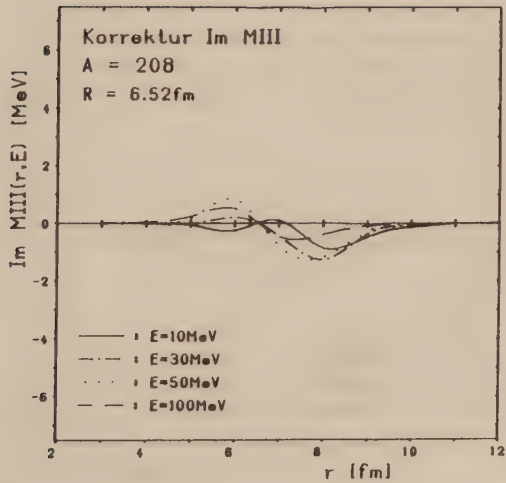


Abb. 6

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

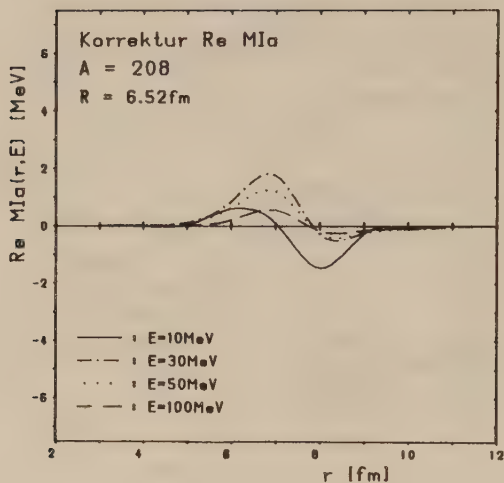


Abb. 7

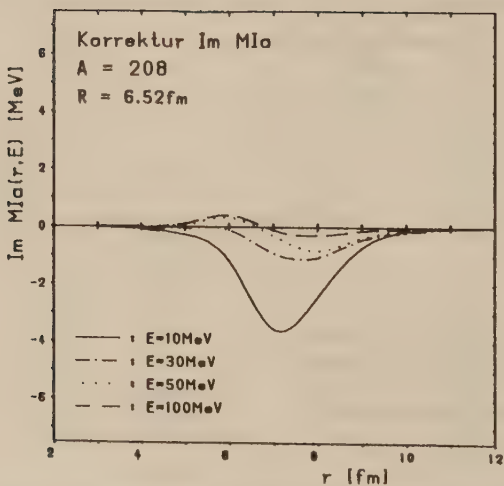


Abb. 8

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

Abb. 9

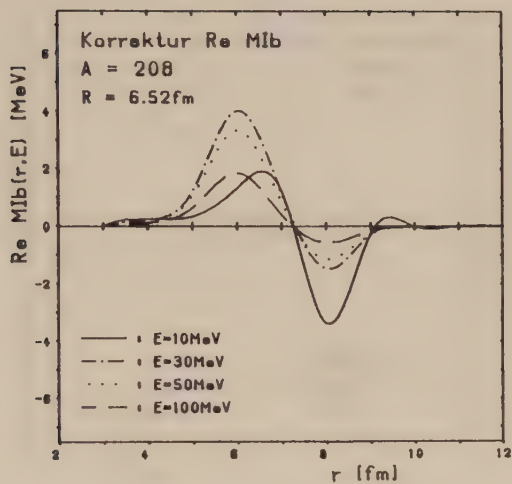
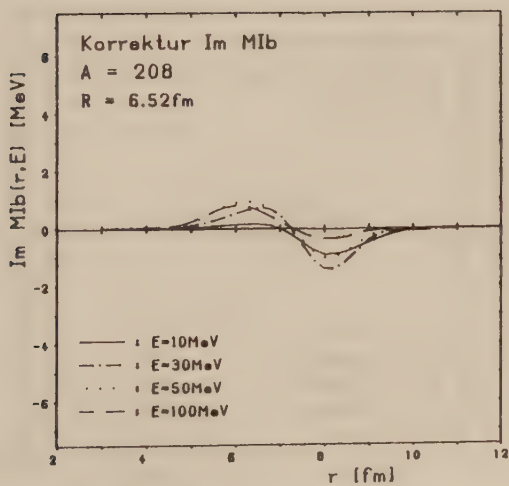


Abb. 10



(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

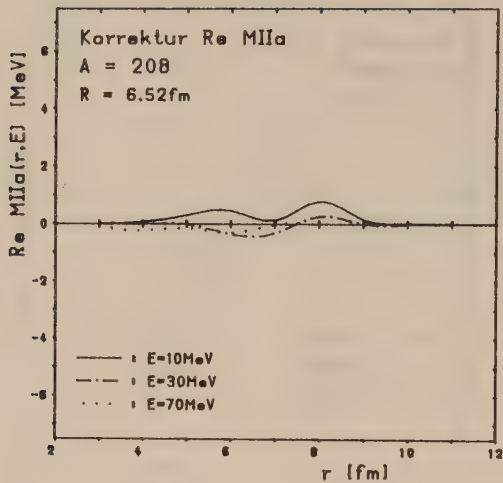


Abb. 11

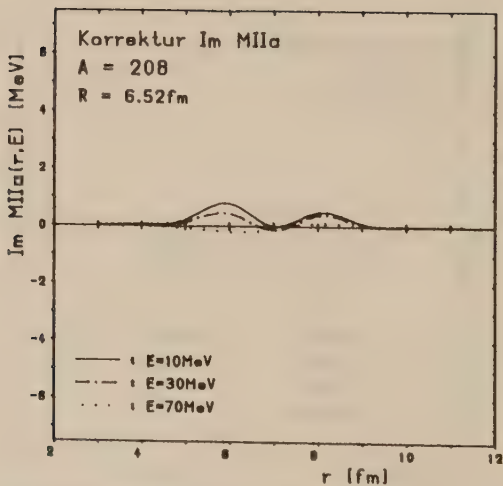


Abb. 12

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

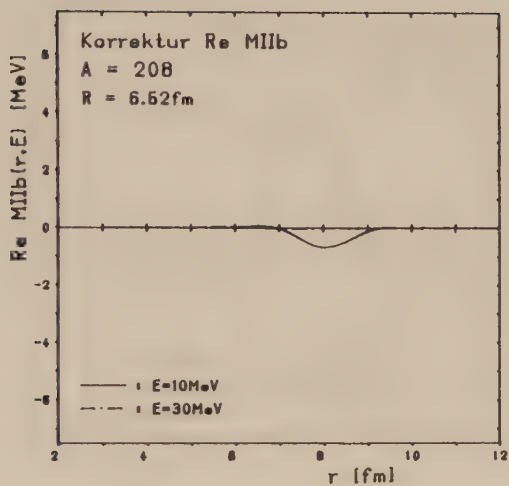


Abb. 13

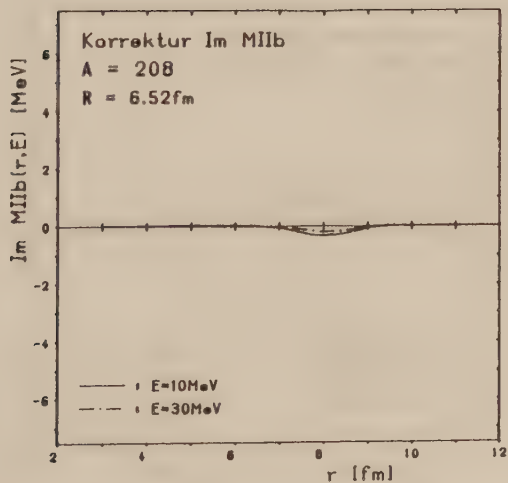


Abb. 14

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

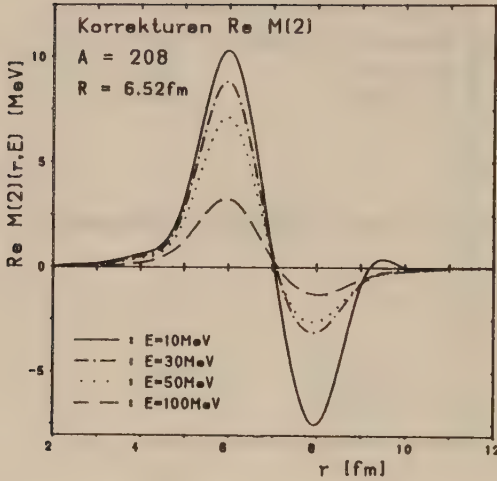


Abb. 15

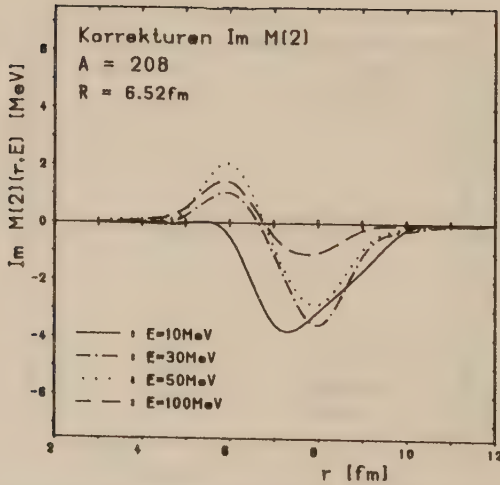


Abb. 16

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

Abb. 17

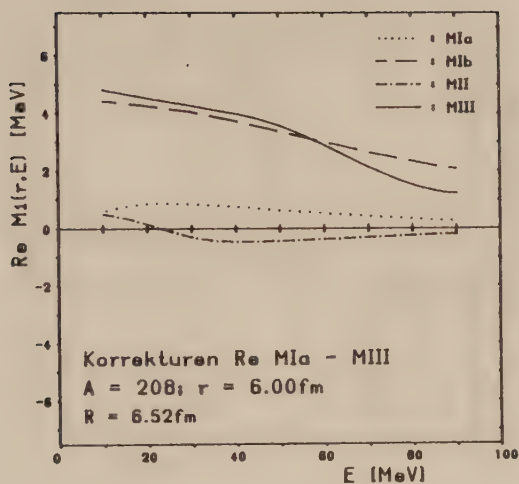
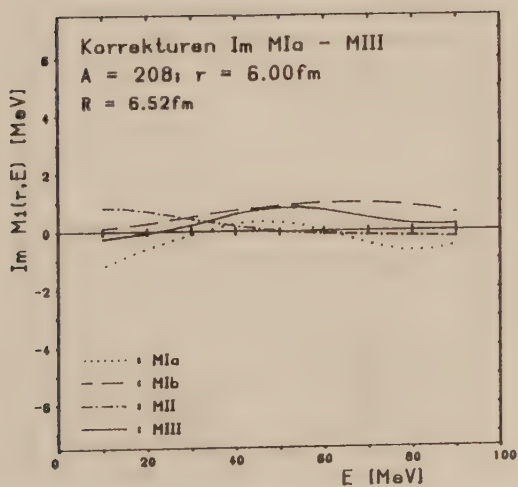


Abb. 18



(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

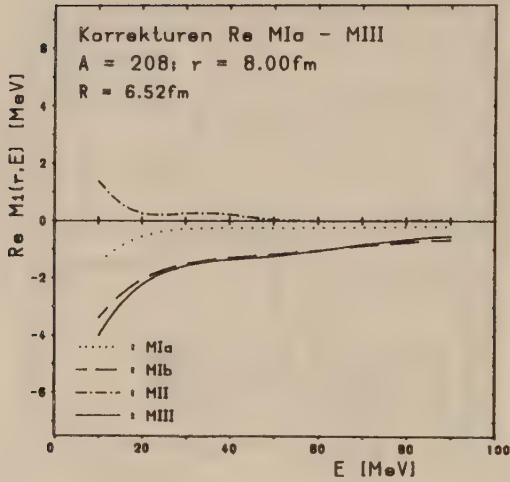


Abb. 19

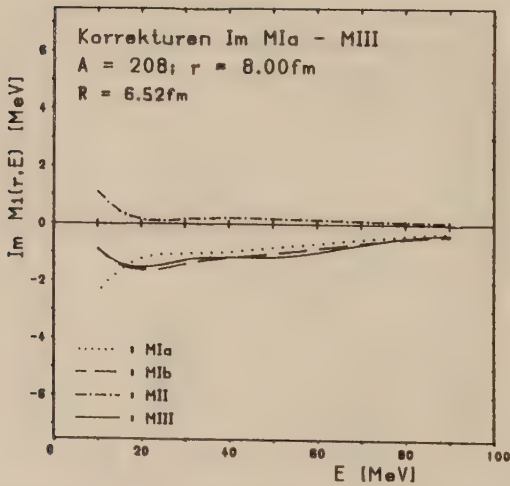


Abb. 20

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

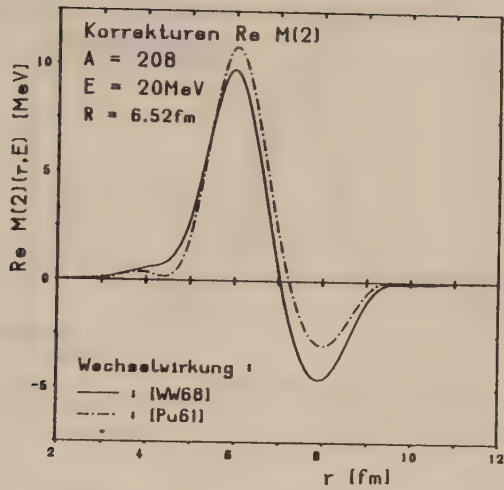


Abb. 21

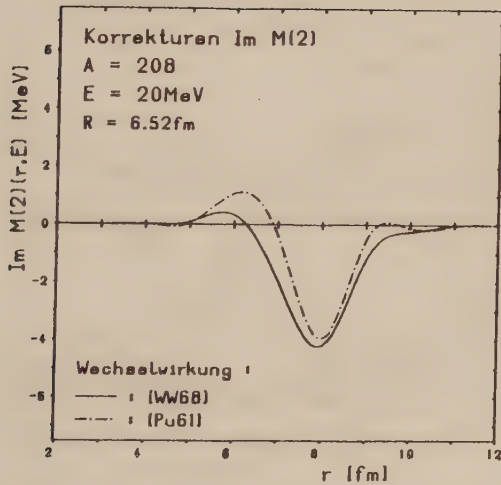


Abb. 22

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

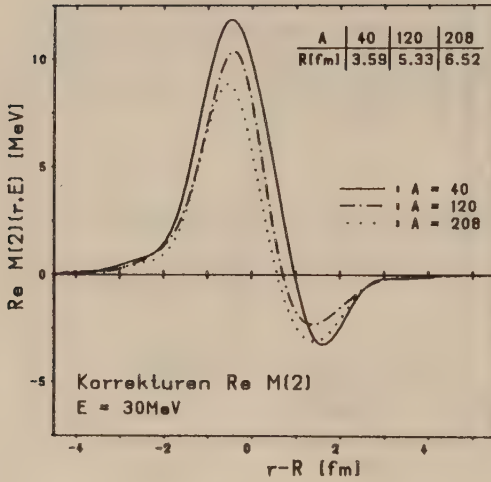


Abb. 23

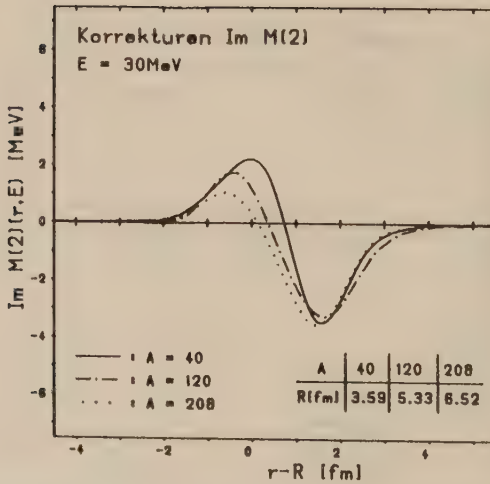


Abb. 24

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

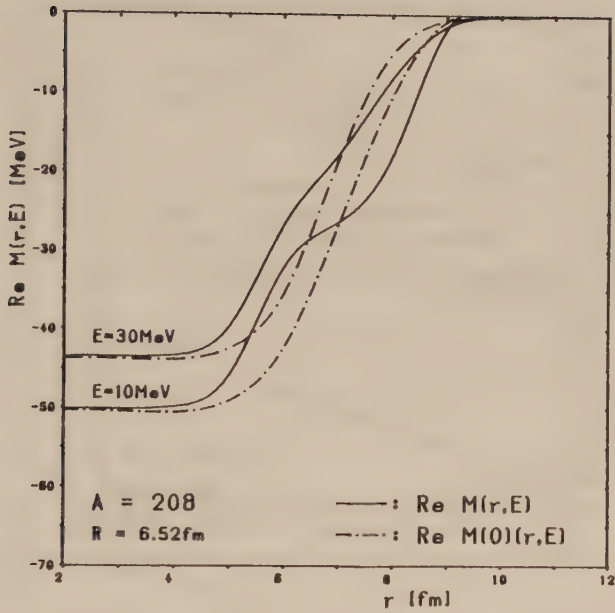


Abb. 25

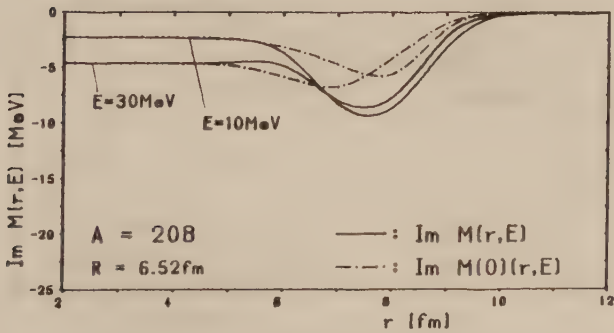


Abb. 26

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

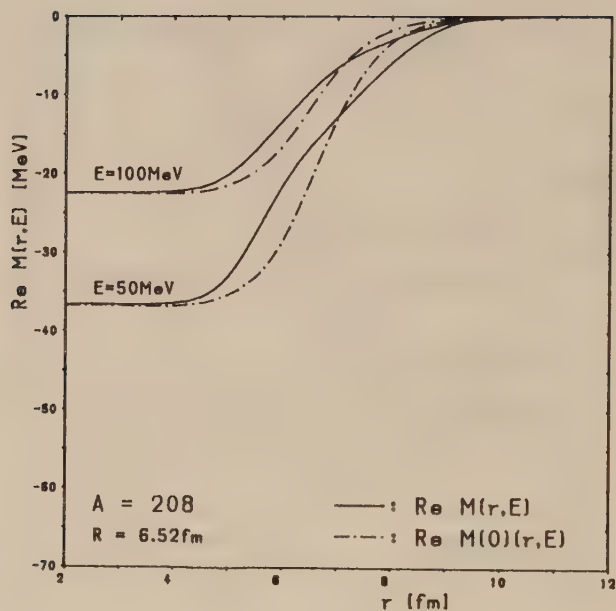


Abb. 27

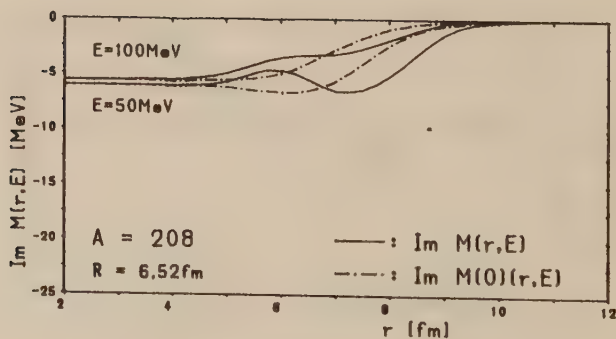


Abb. 28

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

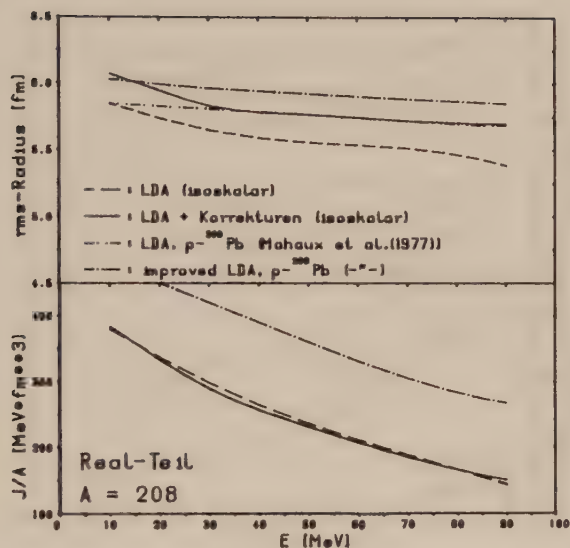


Abb. 29

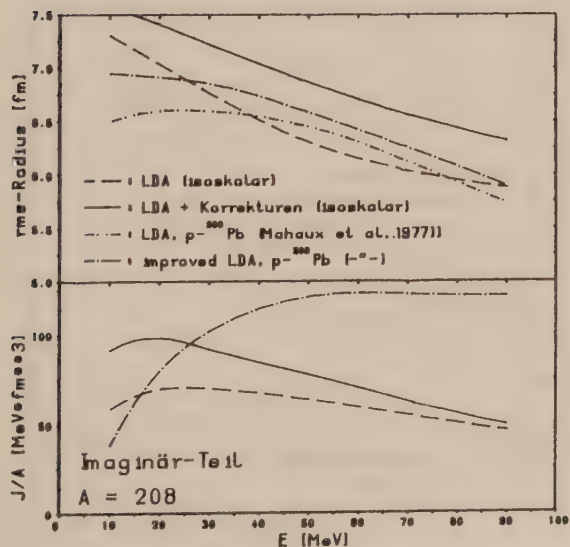


Abb. 30

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

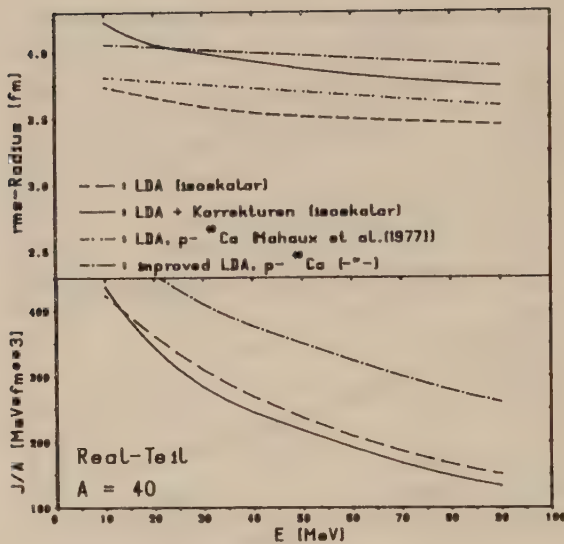


Abb. 31

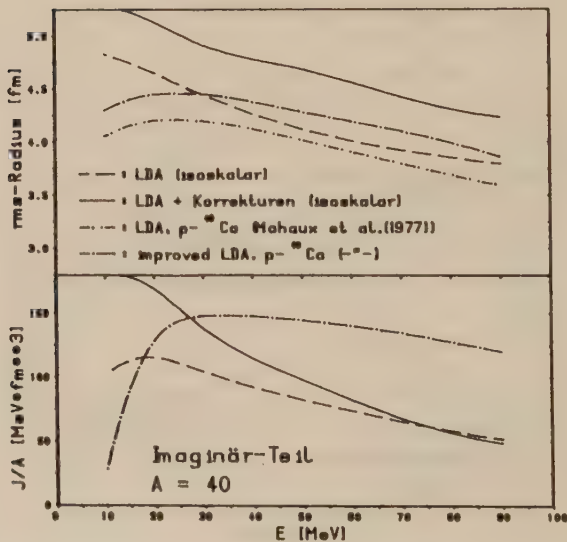


Abb. 32

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

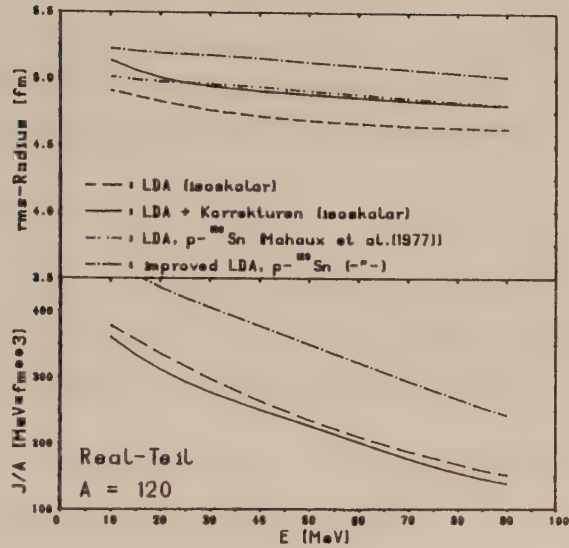


Abb. 33

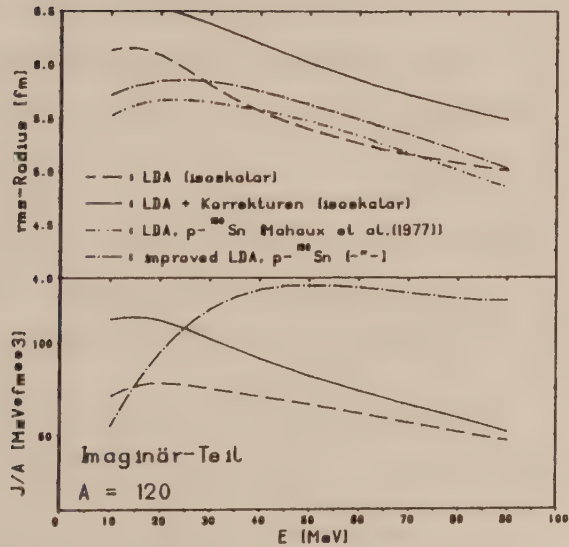


Abb. 34

(Abbildungsunterschriften siehe S.168ff)

Literaturverzeichnis

- AGD63 A.A.Abrikoso, L.P.Gorkov, I.E.Dzyaloshinski, Methods of Quantum Field Theory in Stat. Physics, Prentice-Hall, Englewood Cl., 1963
- AS65 M.Abramowitz, I.Stegun, Handbook of Math.Functions, Dover Publications, New York, 1965
- Ba61 G.A.Baraff, Phys.Rev. 123(1961)2087
- Ba62 G.Baym, Phys.Rev. 127(1962)1391
- BB61 G.A.Baraff, S.Borowitz, Phys.Rev. 121(1961)1704
- BBB83 G.F.Bertsch, P.F.Bortignon, R.A.Brogia, Rev.Mod.Phys. 55(1983)287
- BBJ68 K.A.Brueckner, J.R.Buchler, S.Jorna, R.J.Lombard, Phys.Rev. 171(1968)1188
- BBP63 H.A.Bethe, B.H.Brandow, A.G.Petschek, Phys.Rev. 129(1963)225
- BDB84 J.Bartel, M.Durand, M.Brack, Z.Phys. A315(1984)341
- Be56 H.A.Bethe, Phys.Rev. 103(1956)1353
- Be68 H.A.Bethe, Phys.Rev. 167(1968)879
- Be71 H.A.Bethe, Ann.Rev.Nucl.Sci. 21(1971)93
- BG58 K.A.Brueckner, J.L.Gammel, Phys.Rev. 109(1958)1023
- BG69 F.D.Becchetti, Jr., G.W.Greenlees, Phys.Rev. 182(1969)1190
- BG79 V.Bernard, N.van Giai, Nucl.Phys. A327(1979)397
- BGR78 F.A.Brieva, H.V. von Geramb, J.R.Rook, Phys.Lett. 79B(1978)177
- BGW58 K.A.Brueckner, J.L.Gammel, H.Weitzner, Phys.Rev. 110(1958)431
- Bh77 R.K.Bhaduri, Phys.Rev.Lett. 39(1977)329
- BHQ82 M.Bauer, E.Hernández-Saldana, P.E.Hodgson, J.Quintanilla, J.Phys. G8(1982)525
- BJC76 M.Brack, B.K.Jennings, Y.H.Chu, Phys.Lett. 65B(1976)1
- BK62 G.Baym, L.P.Kadanoff, Quantum Statistical Mechanics, Benjamin, Menlo Park, 1962
- BL55 K.A.Brueckner, C.A.Levinson, Phys.Rev. 97(1955)1344

- BLR61 K.A.Brueckner,A.M.Lockett,M.Rotenberg, Phys.Rev. 121(1961)255
- Br55 K.A.Brueckner, Phys.Rev. 97(1955)1353
- Br67 W.Brenig, Z.Phys. 202(1967)340
- Br72 G.E.Brown, Many-Body Problems, North-Holland, Amsterdam, 1972
- Br77a F.A.Brieva,J.R.Rook, Nucl.Phys. A291(1977)299
- Br77b F.A.Brieva,J.R.Rook, Nucl.Phys. A291(1977)317
- Br78a F.A.Brieva,J.R.Rook, Nucl.Phys. A297(1978)206
- Br78b F.A.Brieva,J.R.Rook, Nucl.Phys. A307(1978)493
- Br79 F.A.Brieva, in: Microscopic Optical Potentials, Lect. Notes in Phys. 89, ed. H.V.von Geramb, Springer, Berlin 1979
- BS59 J.S.Bell,E.J.Squires, Phys.Rev.Lett. 3(1959)96
- BS66 D.E.Beck,A.M.Sessler, Phys.Rev. 146(1966)161
- BW63 W.Brenig,H.Wagner, Z.Phys. 173(1963)484
- BWW84 R.Brugger,M.K.Weigel,J.Winter, Z.Phys. A319(1984)183
- CS53 E.U.Condon,G.H.Shortley, The Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press, 1953
- Da67 B.D.Day, Rev.Mod.Phys. 39(1967)719
- DBS78 M.Durand,M.Brack,P.Schuck, Z.Phys. A286(1978)381
- DSB80 M.Durand,P.Schuck,M.Brack, Z.Phys. A296(1980)87
- Ed64 A.R.Edmonds, Drehimpulse in der Quantenmechanik, BI, Mannheim, 1964
- EW72 G.Eckart,M.Weigel, Phys.Rev. C6(1972)1435
- Fe58 H.Feshbach, Ann.Phys.(NY) 5(1958)357
- Fe62 H.Feshbach, Ann.Phys.(NY) 19(1962)287
- FF72 E.O.Fiset,T.C.Foster, Nucl.Phys. A184(1972)588
- Fr65 W.E.Frahn, Nucl.Phys. 66(1965)358
- FW65 A.L.Fetter,K.M.Watson, Adv.Theor.Phys., Vol.1, ed. K.A.Brueckner, Academic Press, New York, 1965
- FW71 A.L.Fetter,J.D.Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, McGraw-Hill, New York, 1971

- FWP54 H.Feshbach,V.F.Weisskopf,C.E.Porter, Phys.Rev. 96(1954)448
- GBR79 H.V.v.Geramb,F.A.Brieva,J.R.Rook, in: Microscopic Optical Potentials, Lect.Notes in Phys. 89, ed.H.V. von Geramb, Springer, Berlin 1979
- GHK70 G.W.Greenlees,V.Hnizdo,O.Karban,J.Lowe,W.Makofske, Phys.Rev. C2(1970)1063
- GMP70 G.W.Greenlees,W.Makofske,G.J.Pyle, Phys.Rev. C1(1970)1145
- Go57 J.Goldstone, Proc.Roy.Soc., A239(1957)267
- GPT68 G.W.Greenlees,G.J.Pyle,Y.C.Tang, Phys.Rev. 171(1968)1115
- GS67 I.M.Gelfand,G.E.Schilow, Verallgemeinerte Funktionen (Distributionen), Bd.1, DVW, Berlin, 1967
- GV79 B.Grammaticos,A.Voros, Ann.Phys.(NY) 123(1979)359
- GV80 B.Grammaticos,A.Voros, Ann.Phys.(NY) 129(1980)153
- GW76 H.Gall,M.K.Weigel, Z.Phys. A276(1976)45
- GW75 H.Gall,M.Weigel,G.Wegmann, Z.Phys. A275(1975)419
- HK74 Q.Ho-Kim,F.C.Khanna, Ann.Phys.(NY) 86(1974)233
- HM72 J.Hüfner,C.Mahaux, Ann.Phys.(NY) 73(1972)525
- Ho63 P.E.Hodgson, The Optical Model of Elastic Scattering, Clarendon, Oxford, 1963
- Ho71 P.E.Hodgson, Nuclear Reactions and Nuclear Structure, Clarendon, Oxford, 1971
- Ho84a P.E.Hodgson, Nuovo Cimento 81A(1984)250
- Ho84b P.E.Hodgson, Rep.Prog.Phys. 47(1984)613
- HS85a R.W.Hasse,P.Schuck, Nucl.Phys. A438(1985)157
- HS85b R.W.Hasse,P.Schuck, Nucl.Phys. A445(1985)205
- Ir72 J.M.Irvine, Nuclear Structure Theory, Pergamon, Oxford, 1972
- JB75 B.K.Jennings,R.K.Bhaduri, Nucl.Phys. A237(1975)149
- JLM74 J.P.Jeukenne,A.Lejeune,C.Mahaux, Phys.Rev. C10(1974)1391
- JLM75 J.P.Jeukenne,A.Lejeune,C.Mahaux, Nucl.Phys. A245(1975)411

- JLM76 J.P.Jeukenne,A.Lejeune,C.Mahaux, Phys.Rep. 25(1976)83
- JLM77a J.P.Jeukenne,A.Lejeune,C.Mahaux, Phys.Rev. C15(1977)10
- JLM77b J.P.Jeukenne,A.Lejeune,C.Mahaux, Phys.Rev. C16(1977)80
- Ki33 J.G.Kirkwood, Phys.Rev. 44(1933)31
- Ki67 D.A.Kirzhnits, Fieldtheoretical Methods in Many-Body Systems, Pergamon, Oxford, 1967
- LF81 W.G.Love,M.A.Franey, Phys.Rev. C24(1981)1073
- LL80 L.D.Landau,E.M.Lifschitz, Lehrbuch der theoretischen Physik, Bd.9, Akademie-Verlag, Berlin, 1980
- LS52 R.E.Le Levier,D.S.Saxon, Phys.Rev. 87(1952)40
- Lu61 J.M.Luttinger, Phys.Rev. 121(1961)942
- Ma76 R.D.Mattuck, A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem, McGraw-Hill, New York, 1976
- Ma79 C.Mahaux, in: Microscopic Optical Potentials, Lect.Notes in Phys. 89, ed. H.V. von Geramb, Springer, Berlin 1979
- Ma79b C.Mahaux, Nucl.Phys. A328(1979)24
- Ma81 C.Mahaux, in: The Many-Body Problem. Jastrow Correlations vs. Brueckner Theory, Lect.Notes in Phys. 138, eds. R.Guardiola, J.Ros, Springer, Berlin, 1981
- MBB85 C.Mahaux,P.F.Bortignon,R.A.Brogia,C.H.Dasso, Phys. Rep. 120(1985)1
- MGM71 J.J.H.Menet,E.E.Gross,J.J.Malanify,A.Zucker, Phys.Rev. C4(1971)1114
- MH78 C.Marville,P.Haensel, Nucl.Phys. A295(1978)445
- Mi67 A.B.Migdal, Theory of Finite Fermi Systems, Interscience, New York, 1967
- MN84 C.Mahaux,H.Ngô, Nucl.Phys. A431(1984)486
- MS59 P.C.Martin,J.Schwinger, Phys.Rev. 115(1959)1342
- Ne66 R.G.Newton, Scattering Theory of Waves and Particles, McGraw-Hill, New York, 1966

- Ne70 J.W.Negele, Phys.Rev. C1(1970)1260
- Ne75 J.W.Negele, in: Lect.Notes in Phys. 40, ed. B.R.Barrett,
Springer, Berlin, 1975
- No64 P.Nozières, Theory of Interacting Fermi Systems, Benjamin,
New York, 1964
- OWM81 F.Osterfeld,J.Wambach,V.A.Madsen, Phys.Rev. C23(1981)179
- PB62 F.Perey,B.Buck, Nucl.Phys. 32(1962)353
- PP76 C.M.Perey,F.G.Perey, At.Data and Nucl.Data Tabl. 17(1976)1
- PRW66 R.Puff,A.S.Reiner,L.Wilets, Phys. Rev. 149(1966)778
- PS64 F.G.Perey,D.S.Saxon, Phys.Lett. 10(1964)107
- Pu61 R.D.Puff, Ann.Phys.(NY) 13(1961)317
- Re164 A.S.Reiner, Phys.Rev. 133(1964)B1105 55
- Rey63 J.C.Reynolds, Phys.Rev. 130(1963)1891
- RP63 J.C.Reynolds,R.D.Puff, Phys.Rev. 130(1963)1877
- RS80 P.Ring,P.Schuck, The Nuclear Many-Body Problem, Springer,
Berlin, 1980
- Sa76 R.Sartor, Nucl.Phys. A267(1976)29
- Sch61 S.S.Schweber, Relativistic Quantum Field Theory, Row, Peter-
son & Co., Evanston, 1961
- SF74 A.de Shallit,H.Feshbach, Theoretical Nuclear Physics, vol.1,
Wiley & Sons, New York, 1974
- SWW77 J.Speth,E.Werner,W.Wild, Phys.Rep. 33(1977)127
- Ta64 F.Tabakin, Ann.Phys.(NY) 30(1964)51
- Th61 D.J.Thouless, The Quantum Mechanics of Many-Body Systems,
Acad.Press, New York, 1961
- VB72 D.Vautherin,D.M.Brink, Phys.Rev. C5(1972)626
- VB76 N.Vinh Mau,A.Bouyssy, Nucl.Phys. A257(1976)189
- Vi67 F.Villars, in: Fundamentals in Nuclear Theory, ed. A.de Shallit,
C.Villi, IAEA, Wien, 1967
- We66 M.K.Weigel, Habil., Frankfurt, 1966

- We68 G.Wegmann, Z.Phys. 211(1968)235
- We69 M.K.Weigel, Nucl.Phys. A137(1969)629
- We79 M.K.Weigel, in: Microscopic Optical Potentials, Lect.Notes in Phys. 89, ed. H.V. von Geramb, Springer, Berlin, 1979
- We85 M.K.Weigel, J.Phys. G11(1985)L159
- WGH71 M.K.Weigel,L.Garside,P.K.Haug, Phys.Rev. C3(1971)563
- Wi32 E.Wigner, Phys.Rev. 40(1932)749
- WW68 G.Wegmann,M.K.Weigel, Phys.Lett. 26B(1968)245
- WW71 M.K.Weigel,G.Wegmann, Fortschr.Phys. 19(1971)451
- WW85 F.Weber,M.K.Weigel, Phys.Rev. C32(1985)2141

Herrn Prof. Dr. M. Weigel möchte ich für die freundliche und hilfreiche Betreuung bei der Anfertigung dieser Arbeit und für die zahlreichen Ratschläge und klärenden Diskussionen danken.

Herrn Dr. J. Winter danke ich für anregende und klärende Diskussionen.

Lebenslauf

Ich wurde am 27.8.1953 als Sohn des Bankkaufmanns Emil Brugger und dessen Ehefrau Lieselotte Brugger, geb. Behmerburg, in Illertissen geboren. Von 1959 bis 1963 besuchte ich die Volksschule in Illertissen und bis Juli 1972 das Gymnasium in Illertissen (Kolleg der Schulbrüder), wo ich die Reifeprüfung ablegte. Danach leistete ich von September 1972 bis Oktober 1973 Zivildienst beim Arbeiter-Samariter-Bund in Ulm/Donau. Vom Wintersemester 1973 bis zum Sommersemester 1975 studierte ich an der Julius-Maximilians-Universität in Würzburg Physik, wo ich im Oktober 1975 die Diplomvorprüfung bestand. An der Ludwig-Maximilians-Universität in München setzte ich im Wintersemester 1975 mein Studium fort, das ich durch eine Diplomarbeit in theoretischer Physik am Lehrstuhl Prof. Dr. G. Süßmann und durch die Diplomhauptprüfung im August 1981 abschloß. Im September 1981 begann ich am selben Lehrstuhl unter der Anleitung von Prof. Dr. M. Weigel die Anfertigung der Dissertation.

